



Chromodynamique quantique sur réseau et propriétés du nucléon

Rémi Baron

► To cite this version:

Rémi Baron. Chromodynamique quantique sur réseau et propriétés du nucléon. Physique [physics]. Université Paris Sud - Paris XI, 2009. Français. NNT: . tel-00439372

HAL Id: tel-00439372

<https://theses.hal.science/tel-00439372>

Submitted on 7 Dec 2009

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.



N° d'ordre:

THÈSE

Présentée pour obtenir

LE GRADE DE DOCTEUR EN SCIENCES
DE L'UNIVERSITÉ PARIS-SUD XI

Spécialité: Physique

par

Rémi BARON

Chromodynamique quantique sur réseau et propriétés du nucléon

Soutenue le 18 Septembre 2009 devant la Commission d'examen:

Mme	Asmaa ABADA	(Président du jury)
Mme	Véronique BERNARD	(Rapporteur)
Mme	Christine EISENBEIS	
M.	Michel GARÇON	
M.	Pierre GUICHON	(Directeur de thèse)
M.	Federico RAPUANO	(Rapporteur)
M.	Olivier PÈNE	(Invité)

i r f u



cea



s a c l a y



Thèse préparée au
IRFU/Service de Physique Nucléaire
CEA, Centre de Saclay,
91 191 Gif-sur-Yvette, France
et au
Laboratoire de Physique Théorique d'Orsay
Bâtiment 210, Université Paris-Sud 11
91 405 Orsay CEDEX, France

Résumé

L'objet de cette thèse est le calcul ab-initio des propriétés du nucléon en partant de la théorie microscopique de l'interaction forte, la chromodynamique quantique (QCD). Cette théorie, dont les degrés de liberté sont les quarks et les gluons, a été bien testée dans les expériences à haute énergie car la liberté asymptotique, le fait que l'interaction s'annule à courte distance, permet d'utiliser l'approximation perturbative. Pour prédire des propriétés qui font intervenir de grandes distances, comme les masses ou les distributions de courant, il faut un traitement exact de la théorie. Celle-ci est discrétisée sur un réseau quadridimensionnel et les observables quantiques sont calculées par la méthode de l'intégrale de chemin, comme expliqué dans les chapitres II et III. Dans le chapitre IV nous discutons les problèmes posés par la discrétisation des fermions et nous expliquons le choix retenu pour nos calculs c'est-à-dire la discrétisation "à la Wilson" avec masse twistée. Elle présente l'avantage de supprimer les effets de discrétisation de l'ordre de la maille du réseau au prix de l'ajustement d'un paramètre.

Le calcul numérique de l'intégrale de chemin est fait par la méthode de Monte Carlo avec échantillonnage préférentiel. L'algorithme "Hybrid Monte Carlo", basé sur la dynamique moléculaire, est présenté dans le chapitre V ainsi que la méthode de résolution de grands systèmes linéaires creux qui apparaissent dans le calcul des observables. Ce chapitre présente aussi les aspects informatiques du problème, c'est-à-dire le parallélisme massif ainsi que les caractéristiques des machines utilisées. Dans le chapitre VI nous expliquons la méthodologie suivie pour la production des ensembles représentatifs de configuration de jauge. La mise en oeuvre et le contrôle de cette production est une part importante du travail effectué pendant cette thèse.

Les deux derniers chapitres sont consacrés au calcul proprement dit des observables et à la présentation des résultats. La principale difficulté technique, l'évaluation des propagateurs de quark, a été résolue en exploitant au mieux les formes de processeurs disponibles. Une part importante du travail de thèse a été consacrée à ce problème.

Dans la conclusion nous faisons le point sur l'état des calculs de QCD sur réseau et nous discutons de l'évolution du domaine dans la perspective des nouveaux moyens de calculs et des développements théoriques récents.

Mots-clefs : Théorie de jauge sur réseau. Chromodynamique quantique. Modèles et calcul des masses des hadrons. Facteurs de forme électromagnétique. Méthodes Monte Carlo.

Abstract

The goal of this thesis is to compute from first principles nucleon properties, starting from the microscopic theory of strong interaction, quantum chromodynamics (QCD). This theory, whose degrees of freedom are quarks and gluons, has been well tested in high energy experiments thanks to asymptotic freedom, the fact that interaction cancels at short distances, which allows the use of perturbative theory. To predict properties which involve long distances, like masses or current distributions, one needs an exact treatment of the theory. It uses a four-dimensional lattice on which the theory is discretized and quantum observables are computed through path integral techniques, as explained in chapters II and III. In chapter IV we discuss problems faced when fermions are taken into account and we present the choice for our computations ie a discretization à la Wilson plus an additional twisted mass. Its advantage is to remove discretization effects of the order of the lattice spacing provided one parameter is tuned.

The numerical evaluation of path integrals is done by Monte Carlo methods with importance sampling. The “Hybrid Monte Carlo” algorithm, based on molecular dynamics, is presented in chapter V together with a method to solve large sparse linear systems necessary to compute observables. This chapter also describes computer science details of the problem which are the use of massive parallel processing and some characteristics of computers used. In chapter VI we explain how the production of representative samples of gauge configuration is performed. This step and its control is an important part of the work done during this thesis.

The last two chapters are devoted to the computation of observables and to the presentation of results. The main technical difficulty which is to solve for quark propagators has been performed by using available processor farms at their best. A good part of this work has been focused on this.

To conclude we comment on the status of the calculations and we discuss the evolution of the field in the perspective of new computing facilities and recent theoretical progress.

Keywords : Lattice gauge theory. Quantum chromodynamics. Hadron mass models and calculation. Electromagnetic form factors. Monte Carlo methods.

Remerciements

Je tiens tout d'abord à remercier mes directeurs de thèse, Pierre Guichon et Olivier Pène, pour m'avoir encadré et soutenu durant ces trois années de thèse, surtout lors de la difficile étape de la rédaction. J'ai eu le grand plaisir de travailler et d'apprendre avec eux.

Je voudrais exprimer ma gratitude à Asmaa Abada d'avoir accepté de présider mon jury de thèse, à Véronique Bernard et Federico Rapuano pour avoir accepté d'être mes rapporteurs, et enfin à Christine Eisenbeis et Michel Garçon qui ont fait partie du jury.

Je souhaite ensuite remercier les personnes avec lesquelles j'ai pu collaborer durant ma thèse. En tête de cette longue liste se trouvent les membres de la collaboration ETM (European Twisted Mass) dont Karl Jansen est le porte-parole. Les réunions organisées en alternance dans les divers pays participant à cette collaboration ont toujours été pour moi de très bon moments. Je voudrais remercier plus particulièrement Albert Deuzeman, Gregorio Herdoiza, Tomasz Korzec, Zhaofeng Liu, Siebren Reker, Dru Renner, Carsten Urbach, Marc Wagner, Urs Wenger.



FIG. 1 – Logo de la collaboration ETM

Je n'oublie évidemment pas la partie française de la collaboration avec Jean-Christian Anglès d'Auriac, Benoit Blossier, Philippe Boucaud, Mariane Brinet, Jaume Carbonell, Vincent Drach, Pierre-Antoine Harraud, Vincent Morenas, Mauro Papinutto. J'ai beaucoup appris et échangé à leur contact car nous travaillions principalement sur le nucléon. Je suis redevable notamment envers Vincent Drach pour certains résultats bruts concernant la masse du nucléon et du delta. La partie sur les algorithmes doit beaucoup à un cours de Philippe Boucaud organisé dans le cadre du GDR Physique subatomique et calculs sur réseau.

Je voudrais remercier également pour leur aide les nombreux informaticiens des divers centres de calcul que nous avons utilisés. Cette liste qui n'a cessé de s'allonger comprend notamment, par ordre historique, les ordinateurs du Laboratoire de Physique Théorique d'Orsay (LPT), le Centre de Ressources Informatique (CRI) de l'Université Paris-Sud 11, le Centre de Calcul Recherche et Technologie (CCRT), le centre de calcul de l'IN2P3 (CC-IN2P3), le centre de calcul du CNRS (IDRIS) et enfin le Centre Informatique National de l'enseignement supérieur (CINES). Parmi ces informaticiens je voudrais souligner le travail de Olivier Brand-Froissac à propos de l'informatique au LPT et celui de Jean-Yves Nief concernant le système SRB (transfert de données) qui fut extrêmement utile.

J'ai aussi une pensée pour les membres du projet ANR PetaQCD auquel j'ai modestement contribué car il a débuté lors de ma dernière année de thèse.

Je remercie les membres du SPhN et du LPT pour leur accueil. Merci aux secrétaires pour leur aide administrative précieuse. Merci aussi à Madeleine Soyeur, chef du groupe théorie, et aux physiciens du SPhN dont Nicole d'Hose, Etienne Burtin, David Lhuillier qui m'ont donné un aperçu des diverses expériences sur lesquelles ils travaillaient. Cela m'a permis de constater que mon travail au quotidien pouvait être proche de certaines tâches effectuées par les expérimentateurs qui essaient de mesurer des quantités que nous essayont pour notre part de calculer.

Je salue les autres doctorants du LPT et du SPhN comme Benoit Avez, Johan Durand, Benjamin Haas, Guillaume Jegou, Thomas Mueller pour les moments agréables que nous avons partagé en particulier autour d'un café ou d'un chocolat chaud et je souhaite bon courage à ceux qui n'ont pas encore soutenu leur thèse. Merci également à tous ceux qui ont pu ponctuellement contribuer à cette thèse et qui ne sont pas cités ici.

Merci enfin à mes parents pour leur soutien et leurs encouragements durant toutes ces années d'études.

Table des matières

I	Introduction	13
II	Théorie des champs sur réseau	18
1	Intégrale de chemin	19
2	Discrétisation d'un champ scalaire	22
III	Champs de jauge de QCD sur réseau	25
3	Formulation de Wilson	26
4	Actions améliorées	28
5	La limite continue	29
6	Fixation de l'échelle	30
IV	Fermions sur le réseau	32
7	Fermions sur le réseau	33
7.1	Généralités	33
7.2	Problème des doubleurs et terme de Wilson	35
7.3	Symétrie chirale	37
7.4	Fermions de Ginsparg-Wilson	39
8	Twisted mass QCD	40
8.1	Le cas de deux saveurs légères dégénérées	40
8.2	Le cas non-dégénéré	42
V	Partie algorithmique et informatique	44
9	Résumé du problème	45

10 Algorithmes et méthodes numériques	46
10.1 Méthodes Monte Carlo	46
10.2 Nombres aléatoires	48
10.3 Algorithme de Metropolis	49
10.4 HMC	49
10.5 Polynomial HMC	50
10.6 Résolution de systèmes linéaires	51
11 Code tmLQCD	52
11.1 Description	53
11.2 Erreurs courantes	54
12 Les machines	55
12.1 L'utilisation du parallélisme	55
12.2 L'architecture BlueGene	57
VI Production des configurations de jauge	65
13 $N_f = 2$	66
13.1 Réglage des paramètres de HMC	68
13.2 Ajustement de κ	70
13.3 Contrôle de la simulation $N_f = 2$	71
14 $N_f = 2 + 1 + 1$	72
14.1 Réglage des paramètres de PHMC	73
14.2 Création du polynôme	75
14.3 Ajustement de κ	76
14.4 Contrôle de la simulation	77
14.5 Secteur léger	79
14.6 Secteur lourd	82
VII Fonctions à 2 points pour le nucléon et le Delta	84
15 Champs interpolants	86

16 Mesure des masses	87
17 Calcul des corrélateurs	88
18 Smearing	89
18.1 Sur les champs de quarks	89
18.2 Calcul des propagateurs avec smearing	90
18.3 Smearing des liens de jauge	91
19 Résultats $N_f = 2$	93
19.1 Effets de volume fini	96
19.2 Limite du continu	97
19.3 Fits chiraux	100
20 Résultats préliminaires $N_f = 2 + 1 + 1$	102
 VIII Fonctions à 3 points	 105
21 Facteurs de forme et distributions de partons généralisées	106
21.1 Facteurs de forme	106
21.2 Distributions de partons généralisées	107
22 Calcul des corrélateurs	110
23 Extraction du signal	113
24 Opérateurs et constantes de renormalisation	114
25 Résultats	116
25.1 Facteurs de forme isovectoriels	116
25.2 $\langle x \rangle_{u-d}$ et $\langle x \rangle_{\Delta u - \Delta d}$	121
 IX Conclusion	 124
 X Annexes	 128

26 Conventions	129
27 Matrices de Gell-Mann	129
28 Algèbre de Grassmann	130
29 Ordres de grandeurs	131
30 Exemples de fichiers d'entrée pour le code tmLQCD	131
31 Exemple de script pour BlueGene	134
Références	136

Première partie

Introduction

La chromodynamique quantique (ou QCD, de l'anglais Quantum ChromoDynamics), est une théorie physique qui décrit l'interaction forte, l'une des quatre forces fondamentales connues. C'est une théorie de jauge basée sur le groupe $SU(3)$ qui, avec la théorie électrofaible, constitue le modèle standard de la physique des particules. Les champs de base de la chromodynamique quantique sont les quarks et les gluons.

La dynamique de la théorie est exprimée à travers le lagrangien :

$$\mathcal{L}_{QCD} = \bar{\psi}(i\gamma_\mu D_\mu - M)\psi - \frac{1}{4}F_{\mu\nu}^a F_a^{\mu\nu}, \quad (1)$$

où ψ est le champ de quark qui porte les indices de Dirac, de saveur et de couleur et M est la matrice de masse $M = \text{diag}(m_u, m_d, m_s, m_c, m_b, m_t)$. La dérivée covariante D_μ s'écrit

$$D_\mu = \partial_\mu + igA_\mu^a \frac{\lambda_a}{2}$$

où les matrices λ_a , qui agissent sur les indices de couleur, sont les matrices de Gell-Mann (voir appendice 27), A_μ^a est le champ de jauge et g la constante de couplage. Le tenseur $F_{\mu\nu}^a$ est défini par

$$F_{\mu\nu}^a = \partial_\mu A_\nu^a - \partial_\nu A_\mu^a - gf^{abc}A_\mu^b A_\nu^c$$

Il est souvent commode d'utiliser la notation matricielle :

$$A_\mu = \sum_a A_\mu^a \frac{\lambda_a}{2}, \quad F_{\mu\nu} = \sum_a F_{\mu\nu}^a \frac{\lambda_a}{2}$$

qui permet de définir les transformations de jauge locales sous la forme compacte :

$$\psi(x) \rightarrow G(x)\psi(x), \quad (2)$$

$$A_\mu(x) \rightarrow G(x)(A_\mu(x) - ig\partial)G(x)^{-1} \quad (3)$$

où $G(x)$ est une matrice de $SU(3)$. Lors d'une telle transformation on a

$$F_{\mu\nu}(x) \rightarrow G(x)F_{\mu\nu}G^{-1}(x).$$

Le lagrangien défini par l'équation (1) est par construction invariant sous les transformations de jauge locales. Cette invariance est à l'origine de l'interaction quark-gluon et gluon-gluon avec des couplages bien définis, c'est pourquoi il est fondamental de la préserver dans les approximations utilisées pour résoudre la théorie. C'est ce qui a guidé K.Wilson [131] dans sa formulation de QCD sur réseau.

L'écriture la plus générale d'un lagrangien incluant des termes invariants de jauge et renormalisables autorise la présence d'un terme supplémentaire (terme θ) proportionnel à $F_{\mu\nu}^a \tilde{F}^{a\mu\nu}$ où $\tilde{F}^{a\mu\nu} = \epsilon^{\mu\nu\alpha\beta} F_{\alpha\beta}^a$. Ce terme viole la symétrie CP dans le secteur de l'interaction forte, or les mesures expérimentales (moment électrique dipolaire du neutron) indiquent une valeur compatible avec zéro. Ce terme sera donc ignoré dans le reste de cette thèse.

La QCD possède deux propriétés singulières qui sont la liberté asymptotique et le confinement. La liberté asymptotique signifie que les quarks et les gluons n'interagissent pas à courte distance, ce qui permet a priori l'utilisation des méthodes perturbatives. Cependant en raison du confinement, les observables physiques contiennent toujours une superposition d'effets de longue et courte distance. Les théorèmes de factorisation,

basés sur QCD, permettent de décomposer les processus comportant au moins une échelle cinématique dure en une partie calculable en théorie des perturbations convoluée avec un facteur non perturbatif. Ce dernier, qui contient les effets de longue distance est indépendant de la réaction considérée et peut être extrait de l'expérience. C'est le cas par exemple des distributions de partons. Un des défis proposé aux calculs sur réseau est d'évaluer ab-initio ces quantités non perturbatives.

La complexité évidente de QCD dans le domaine non perturbatif a conduit à diverses approches. La première est la construction de modèles inspirés de QCD et visant à décrire de façon semi-quantitative les propriétés des hadrons. Ce sont les modèles de quarks

- Modèle des quarks constituants [72, 82]
- Modèle du sac [29, 23]
- Modèle de solitons [54]

La seconde approche exploite systématiquement l'existence d'un petit paramètre dans la théorie :

- Approximation en $1/N_c$ où N_c est le nombre de couleurs [122]
- Approximation semi-classique ($\hbar \rightarrow 0$) [123, 26]

Dans la même catégorie, mais à un niveau plus quantitatif nous avons :

- La théorie de perturbation chirale basée sur le fait que la masse des quarks u et d est petite comparée à une masse hadronique typique [127, 57, 58]
- La théorie effective des quarks lourds [73]

qui non seulement ont une valeur phénoménologique propre mais de plus sont utilisées systématiquement pour analyser les résultats des calculs sur réseau comme on le verra dans la section 19.3.

La troisième approche est beaucoup plus ambitieuse puisqu'elle prétend résoudre QCD en discrétisant la théorie sur réseau, et en calculant numériquement ses prédictions. En particulier la possibilité de varier les paramètres de QCD permet de cerner les domaines de validité des approches précédentes (comme illustré sur la figure 2). Cependant il faut bien réaliser que cette approche ne peut aborder tous les problèmes de physique. Par exemple le traitement de la diffusion hadron-hadron dans le cas général semble hors de portée. De même les opérateurs qui impliquent une distance le long du cône de lumière, comme les distributions de partons, ne peuvent pas être prolongés dans l'espace Euclidien puisque cette distance se réduit à un point. Aussi dans les calculs à température finie l'introduction d'un potentiel chimique fini n'est pas résolu. La liste des problèmes conceptuels liés à la formulation euclidienne sur réseau est sans doute plus longue que le suggèrent les quelques exemples précédemment cités, ce qui incite à bien délimiter le domaine d'application de cette approche. Essentiellement elle prétend calculer les propriétés du vide et du hadron isolé et doit donc toujours être associée à une approche phénoménologique de type théorie effective.

Proposée à l'origine par K.Wilson [131] pour expliquer le confinement des quarks, ce que l'on appelle maintenant QCD sur réseau a été simulé numériquement pour la première fois par M.Creutz [33], ouvrant ainsi la voie à un nouveau domaine de la physique.

Le sujet de cette thèse est l'utilisation d'une formulation récente, appelée *twisted mass QCD* [52], pour calculer les propriétés des hadrons. Il s'agit d'une nouvelle façon de discrétiser les champs de quarks qui permet de simuler la théorie avec des masses de quarks proches de leur valeur physique, un problème notoirement difficile lorsque les

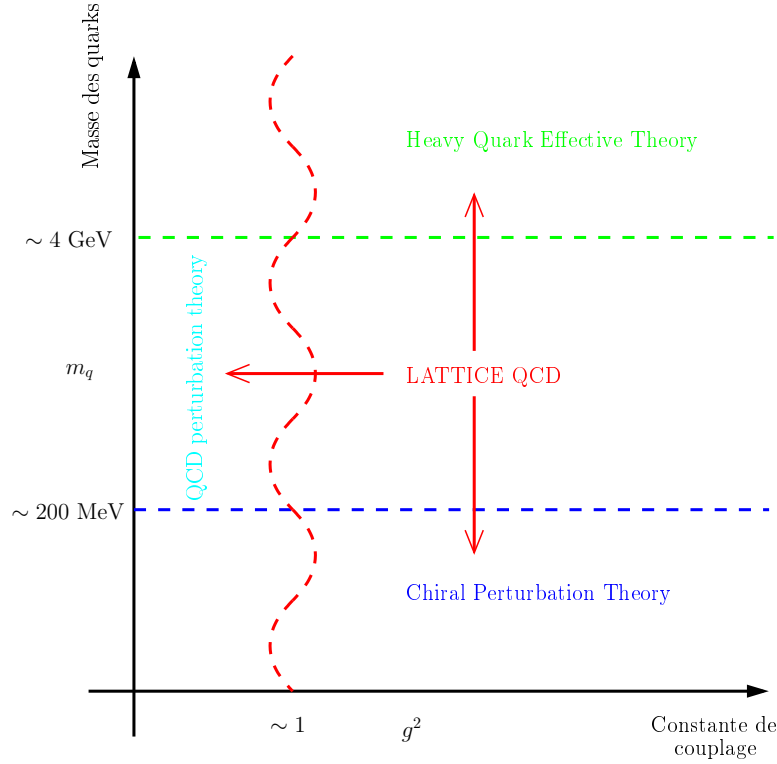


FIG. 2 – Domaine de validité des différentes approches pour étudier QCD. Figure reproduite de [66].

quarks sont dynamiques, c'est-à-dire peuvent être créés sous forme de paires virtuelles. Le terme twisté est apparu pour la première fois dans un papier d'Aoki [8] étudiant le diagramme de phase de QCD avec des fermions de Wilson. Les applications présentées dans ce travail sont la masse du nucléon et de la résonance $\Delta(3/2, 3/2)$, ainsi que les facteurs de forme élastiques et les moments des fonctions de structure du nucléon. Un des objectifs est aussi de calculer les moments des distributions de partons généralisées, mais l'exploitation des simulations correspondantes n'est pas terminée. Une part importante de cette thèse a été consacrée à l'ajustement des paramètres de la simulation et à la production des configurations de jauge qui sont la base de tout calcul d'observable sur réseau. Un chapitre sera dévolu aux aspects calcul intensif de cette étape essentielle.

Tout calcul d'observable mettant en jeu les quarks de valence nécessite le calcul du propagateur d'un quark interagissant avec le champ de jauge. L'inversion numérique de l'équation de Dirac correspondante a aussi été une part importante de ce travail.

Tout le travail fait dans cette thèse a été fait dans le cadre de la collaboration européenne ETM (European Twisted Mass). Cette collaboration regroupe huit pays :

1. Allemagne : Berlin/Zeuthen, Hambourg, Münster
2. Espagne : Valence
3. France : Orsay, Grenoble, Saclay
4. Italie : Rome I, II, III, Trente
5. Hollande : Groningue
6. Royaume-Uni : Liverpool
7. Suisse : Berne

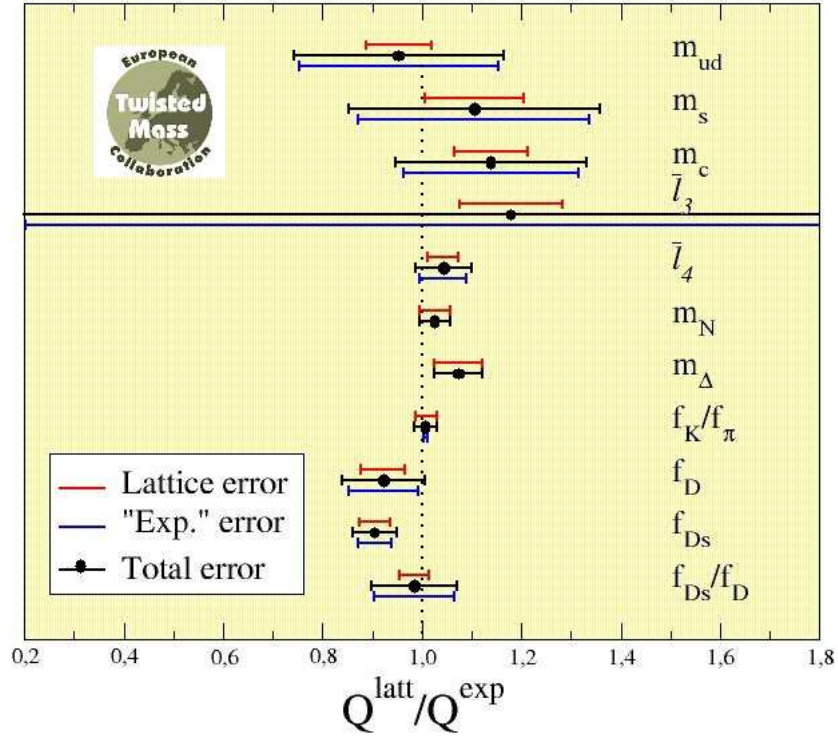


FIG. 3 – Sélection de résultats de ETMC (Vittorio Lubicz).

8. Chypre : Nicosie

qui partagent les ressources informatiques et les compétences pour calculer une vaste palette de quantités physiques. Les résultats déjà publiés pour les simulations avec deux saveurs de quarks dégénérés présentent une analyse détaillée de la physique des mésons légers [19, 20], les distributions de partons du pion [10], le calcul non perturbatif des constantes de renormalisation [39, 86], le calcul de la masse des quarks légers [87, 15, 16], le facteur de forme du pion [116], les mésons neutres [95, 75], la différence de masse ω - ρ [92], la fonction de Isgur-Wise [17] et les contributions hadroniques à $g-2$ [112].

Deuxième partie

Théorie des champs sur réseau

Sommaire

1	Intégrale de chemin	19
2	Discretisation d'un champ scalaire	22

Les calculs de QCD sur réseau sont basés sur le formalisme de l'intégrale de chemin qui permet de prendre en compte toutes les fluctuations quantiques une fois que l'on s'est donné l'action. Dans ce chapitre nous donnons une introduction élémentaire à ce formalisme en partant d'un système à un degré de liberté et en généralisant à un champ scalaire. Un exposé exhaustif sur ce sujet peut être trouvé dans la référence [128].

1 Intégrale de chemin

Considérons le cas simple d'un système quantique à une dimension. Soit $V(x)$ le potentiel de telle sorte que le hamiltonien s'écrive :

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{q}).$$

Le symbole $\hat{}$ est ici pour souligner le fait que l'impulsion \hat{p} et la position \hat{q} sont des opérateurs qui satisfont la relation $[\hat{q}, \hat{p}] = i$. Soit $|\psi\rangle$ les états physiques, c'est-à-dire les éléments d'un espace de Hilbert.

L'évolution du système est régie par l'équation de Schrödinger :

$$i \frac{\partial}{\partial t} |\psi\rangle = \hat{H} |\psi\rangle.$$

La solution avec la condition initiale $|\psi(0)\rangle$ à $t = 0$ est

$$|\psi(t)\rangle = e^{-i\hat{H}t} |\psi(0)\rangle.$$

L'action de l'opérateur position \hat{q} sur les états de position $|q\rangle$ est

$$\hat{q}|q\rangle = q|q\rangle.$$

La normalisation est $\langle q'|q\rangle = \delta(q' - q)$ et nous retrouvons la fonction ψ en calculant $\psi(q, t) = \langle q|\psi(t)\rangle = \langle q|e^{-i\hat{H}t}|\psi(0)\rangle$. En insérant une base complète d'états

$$\int_{\mathbb{R}} dq' |q'\rangle \langle q'| = \mathbb{1}$$

nous obtenons

$$\psi(q, t) = \int_{\mathbb{R}} dq_0 \underbrace{\langle q|e^{-i\hat{H}t}|q_0\rangle}_{\text{opérateur d'évolution}} \psi(q_0, 0).$$

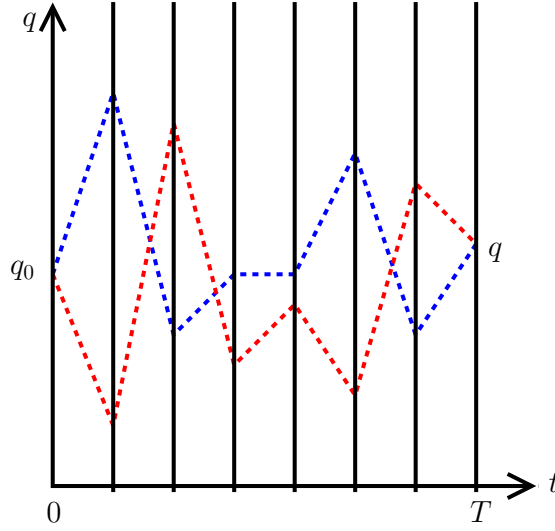
Répetons cela en choisissant :

$t_0 = 0 < t_1 = \delta t < \dots < t_r = r\delta t < \dots < t_n = n\delta t < t_{n+1} = T$ où $\delta t = \frac{T}{n+1}$ de telle sorte que

$$\psi(q, T) = \int_{\mathbb{R}} \prod_{r=0}^n dq_r \langle q_{r+1} | e^{-i\hat{H}(t_{r+1}-t_r)} | q_r \rangle \psi(q_0, 0).$$

Considérons le cas où n tend vers l'infini ce qui implique que δt tende vers zéro (T est fixé) et examinons $K_r = \langle q_{r+1} | e^{-i\hat{H}\delta t} | q_r \rangle$. La formule de Baker-Campbell-Hausdorff donne

$$K_r \approx \langle q_{r+1} | e^{-i\frac{\hat{p}^2}{2m}\delta t} e^{-iV(\hat{q})\delta t} | q_r \rangle.$$

FIG. 4 – Exemple de deux chemins allant de q_0 à q .

Nous avons

$$e^{-iV(\hat{q})\delta t}|q_r\rangle = e^{-iV(q_r)\delta t}|q_r\rangle$$

et en utilisant la complétude des états propres de l'impulsion $|p\rangle$

$$\langle q|e^{-i\frac{\hat{p}^2}{2m}\delta t}|q'\rangle = \int dp \langle q|e^{-i\frac{\hat{p}^2}{2m}\delta t}|p\rangle \langle p|q'\rangle = \sqrt{\frac{m}{2\pi i\delta t}} e^{-im\frac{(q-q')^2}{2\delta t}}.$$

En combinant le tout, nous obtenons, dans la limite où n tend vers l'infini, la formulation de la mécanique quantique en terme d'intégrale de chemin

$$\langle q|e^{-i\hat{H}T}|q_0\rangle = \int_{\substack{\text{tous chemins } q(t) \\ q(0)=q_0 \\ q(T)=q}} [dq] e^{iS[q]} \quad (4)$$

où $[dq]$ est la mesure définie par

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \prod_{r=1}^n \sqrt{\frac{m}{2\pi i\delta t}} dq_r$$

et l'action

$$S[q] = \int_0^T dt \frac{\dot{q}^2}{2m} - V(q)$$

L'intégrale de chemin qui apparaît dans l'équation (4) est une notation symbolique pour la limite quand n tend vers l'infini de la version discrétisée.

L'argument de l'exponentielle est l'action $S[q]$ car nous avons utilisé un système d'unités où $\hbar = 1$. La limite classique correspond donc à $S[q] \gg 1$ et l'approximation de la phase stationnaire nous dit que dans cette limite seuls les chemins qui satisfont les équations du mouvement

$$\frac{\delta S}{\delta q} = 0$$

contribuent à l'intégrale (4). L'approximation semi-classique consiste à prendre en compte les fluctuations autour de ces chemins stationnaires.

La généralisation à un nombre quelconque de degrés de liberté discrets est évidente. Dans le cas d'une théorie de champ continue on remplace le champ $\phi(t, \vec{x})$ par ses valeurs aux points x_i d'un réseau à trois dimensions et on retombe sur le cas d'un système à N degrés de liberté. Ceci est détaillé dans la section suivante.

On montre alors que les fonctions de Green peuvent être calculées suivant

$$\langle T(\phi(x_1)\phi(x_2)\cdots) \rangle = \frac{1}{Z} \int [d\phi] \phi(x_1)\phi(x_2)\cdots e^{iS[\phi]}$$

où Z est défini par

$$Z = \int [d\phi] e^{iS[\phi]}.$$

La présence du facteur i dans l'exponentielle conduit à des intégrales oscillantes qu'il est impossible de traiter numériquement. La solution est d'utiliser un temps imaginaire en faisant ce que l'on appelle une rotation de Wick. En suivant les mêmes étapes que précédemment nous trouverions *l'intégrale de chemin Euclidienne*

$$\langle q | e^{-\hat{H}\tau} | q_0 \rangle = \int_{\substack{\text{tous chemins } q(t) \\ q(0)=q_0 \\ q(T)=q}} [dq] e^{-S_E[q]} \quad (5)$$

où S_E est l'action Euclidienne

$$S_E[q] = \int_0^T dt \frac{\dot{q}^2}{2m} + V(q)$$

qui est positive si $V(q)$ est borné inférieurement ce qui permet d'interpréter le facteur $\exp(-S_E)$ comme une densité de probabilité. On peut donc envisager de calculer l'intégrale fonctionnelle par des méthodes stochastiques.

A titre d'exemple, regardons comment l'on évalue la masse d'une particule. Considérons un opérateur $\mathcal{O}_\phi(t)$ tel que $\mathcal{O}_\phi(t)|0\rangle$ donne une approximation de l'état associé à la particule. Implicitement on intègre sur les variables spatiales des champs qui composent l'opérateur pour que l'impulsion de l'état soit nulle et t est le temps commun à tous les champs $\phi(t, \vec{x})$. Par exemple on pourrait considérer

$$\mathcal{O}_\phi(t) = \int d\vec{x} \phi(t, \vec{x})^2.$$

Choisissons les variables temporelles des champs pour que le produit ordonné soit égal au produit ordinaire. On peut alors évaluer le corrélateur $\langle \mathcal{O}_\phi(t_1)\mathcal{O}_\phi(t_2) \rangle$ grâce à l'intégrale de chemin

$$\langle \mathcal{O}_\phi(t_1)\mathcal{O}_\phi(t_2) \rangle = \frac{1}{Z} \int [d\phi] \mathcal{O}_\phi(t_1)\mathcal{O}_\phi(t_2) e^{-S[\phi]}$$

D'autre part on a

$$\langle \mathcal{O}_\phi(t_1)\mathcal{O}_\phi(t_2) \rangle = \langle 0 | \mathcal{O} e^{-H(t_1-t_2)} \mathcal{O} | 0 \rangle \quad (6)$$

$$= \sum_n |\langle 0 | \mathcal{O} | n \rangle|^2 e^{-M_n(t_1-t_2)}. \quad (7)$$

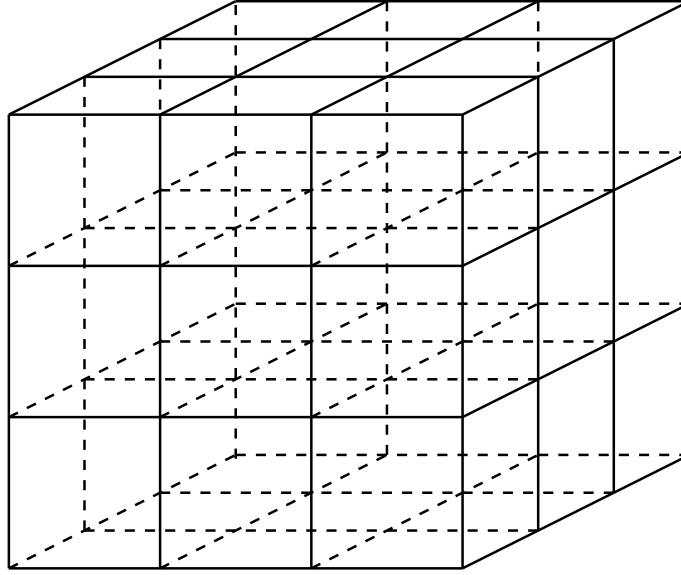


FIG. 5 – Réseau régulier en 3 dimensions.

En étudiant la dépendance du corrélateur en fonction de $t_1 - t_2$ on peut donc accéder aux masses des particules qui sont créées par l'opérateur \mathcal{O} agissant sur le vide. En particulier quand $t_1 - t_2$ tend vers l'infini seul l'état fondamental contribue à la somme (7).

2 Discrétisation d'un champ scalaire

Pour illustrer les idées essentielles du passage du continu vers le discret et introduire des notations utiles pour la suite, nous examinerons dans cette section le cas de la discrétisation d'un champ scalaire réel ϕ obéissant à l'équation de Klein-Gordon. Afin de donner une définition précise à l'intégrale de chemin, nous généralisons ce qui a été fait dans le cas à une dimension pour la mécanique quantique dans la section 1. Les variables dynamiques sont $\phi(\vec{x}, t)$ pour chaque \vec{x} appartenant à un réseau à 3 dimensions défini par $a\mathbb{Z}^3$ où a est le pas du réseau, aussi appelé la *maille*. Nous devons aussi discrétiser le temps et par simplicité nous prendrons le pas en temps égal à a aussi. Ceci n'est pas obligatoire, et dans certains cas il est même avantageux de disposer d'une meilleure résolution en temps qu'en espace. Enfin comme nous ne pouvons pas travailler avec un nombre infini de variables sur ordinateur, nous utiliserons un réseau hypercubique fini

$$\Lambda = \{x/x_\mu = m_\mu a \text{ où } m_\mu = 0, 1, \dots, N-1 \text{ et } \mu = 0, 1, \dots, 3\}$$

avec des conditions aux limites périodiques (l'hypercube a donc la topologie d'un tore). On verra que pour les champs de jauge les conditions aux limites périodiques sont aussi utilisées, mais que pour les fermions les conditions aux limites sont anti-périodiques dans la direction temporelle à cause de l'anti-commutation des champs de fermions.

Les dérivées du champ sont remplacées par des différences finies et les intégrales sur

l'espace-temps deviennent des sommes sur les points du réseau :

$$\partial_\mu \phi(x) \longrightarrow \begin{cases} \nabla_\mu \phi(x) \equiv \frac{\phi(x+a\hat{\mu})-\phi(x)}{a} \\ \hat{\mu} \text{ est le vecteur unit  dans la direction } \mu \end{cases} \quad (8a)$$

$$\int d^4x \longrightarrow \sum_{x \in \Lambda} a^4 \quad (8b)$$

Ainsi pour des fonctions f suffisamment r guli res nous avons dans la *limite du continu* ($a \longrightarrow 0$) :

$$\begin{aligned} \nabla_\mu f(x) &\xrightarrow{a \rightarrow 0} \partial_\mu f(x) \\ \sum_{x \in \Lambda} a^4 f(x) &\xrightarrow{a \rightarrow 0} \int_{V=\{x: 0 \leq x_\mu \leq L\}} d^4x f(x) \end{aligned} \quad N \rightarrow +\infty, L = Na \text{ fix }$$

Le choix de r gularisation ( quations (8)) a  t  fait de mani re   ce que la limite du continu de l'action sur r seau permette de retrouver l'action continue si les champs sont assez r guli rs. Nous aurions pu choisir un autre sch ma de discr tisation comme par exemple

$$\partial_\mu \phi(x) \longrightarrow \begin{cases} \nabla_\mu \phi(x) \equiv \frac{\phi(x+a\hat{\mu})-\phi(x-a\hat{\mu})}{2a} \\ \hat{\mu} \text{ est le vecteur unit  dans la direction } \mu \end{cases}$$

Les diff rents sch mas de discr tisation doivent donner le m me r sultat dans la limite du continu, mais il peut  tre avantageux de choisir un sch ma plut t qu'un autre pour am liorer la convergence ou r duire les erreurs.

Le pas du r seau  tant non nul, ceci conduit   l'apparition d'un cutoff dans l'espace des impulsions. De plus, les impulsions sont discr tes avec un pas de $\frac{2\pi}{L}$ dans chaque direction et la transform e de Fourier du champ

$$\tilde{\phi}(p) = \sum_{x \in \Lambda} a^4 e^{-ip \cdot x} \phi(x), \text{ o  } p \cdot x = \sum_{\mu} p_\mu x_\mu,$$

est p riodique

$$\tilde{\phi}(p_\mu + \frac{2\pi}{a}) = \tilde{\phi}(p_\mu) \quad \forall \mu.$$

Ainsi nous pouvons restreindre les impulsions   la premi re zone de Brillouin

$$\mathcal{B} = \left\{ p : -\frac{\pi}{a} < p_\mu \leq \frac{\pi}{a} \right\}.$$

L'int grale de chemin est maintenant bien d finie car elle se r duit   l'int gration par rapport aux variables $\phi(x)$ pour $x \in \Lambda$:

$$\int [d\phi] \rightarrow \int \prod_{x \in \Lambda} d\phi(x).$$

Calculons le propagateur dans le cas d'une th orie avec un champ scalaire libre. Ce calcul sera utile lorsque l'on verra le cas des fermions dans la partie 7. L'action de Klein-Gordon de la th orie continue est, dans le cas euclidien :

$$\frac{1}{2} \int d^4x ((\partial_\mu \phi(x))^2 + m^2 \phi(x)^2).$$

Une intégration par parties conduit à

$$\frac{1}{2} \int d^4x (\phi(x)(\square + m^2)\phi(x)), \text{ où } \square = - \sum_{\mu} \partial_{\mu} \partial_{\mu}$$

car le terme de surface s'annule à cause des conditions aux limites périodiques. Ce qui donne l'action sur réseau suivante :

$$S = \frac{1}{2} \sum_{x \in \Lambda} a^4 \phi(x)(\square + m^2)\phi(x) = \frac{1}{2} \sum_{x,y \in \Lambda} S_{xy} \phi(x)\phi(y)$$

où maintenant

$$\square f(x) = -\frac{1}{a^2} \sum_{\mu} (f(x + a\hat{\mu}) - 2f(x) + f(x - a\hat{\mu}))$$

et

$$S_{xy} = a^4(\square + m^2)\delta_{x,y}$$

est une matrice dont les indices sont les points du réseau. Le propagateur sur réseau est l'inverse, au sens matriciel, de S_{xy} :

$$\sum_{y \in \Lambda} S_{xy} G_{yz} = \delta_{x,z} \quad (9)$$

En substituant la transformée de Fourier

$$G_{yz} = \frac{1}{L^4} \sum_{p \in \mathcal{B}} e^{ip \cdot (y-z)} \tilde{G}(p)$$

dans (9) on obtient :

$$\begin{aligned} \frac{1}{L^4} \sum_{p \in \mathcal{B}} a^4(m^2 + \square) e^{ip \cdot (x-z)} \tilde{G}(p) &= \delta_{x,z} \\ \frac{1}{L^4} \sum_{p \in \mathcal{B}} a^4(m^2 + a^{-2} \sum_{\mu} (-e^{iap_{\mu}} + 2 - e^{-iap_{\mu}})) e^{ip \cdot (x-z)} \tilde{G}(p) &= \delta_{x,z} \\ \frac{1}{L^4} \sum_{p \in \mathcal{B}} a^4(m^2 + a^{-2} \sum_{\mu} (2 - 2 \cos(ap_{\mu}))) \tilde{G}(p) e^{ip \cdot (x-z)} &= \frac{1}{L^4} \sum_{p \in \mathcal{B}} a^4 e^{ip \cdot (x-z)} \end{aligned}$$

De la dernière équation on déduit que

$$\tilde{G}(p) = \frac{1}{m^2 + a^{-2} \sum_{\mu} (2 - 2 \cos(ap_{\mu}))}$$

Dans la limite du continu ($a \rightarrow 0$) on obtient

$$\tilde{G}(p) = \frac{1}{m^2 + p^2} + O(a^2)$$

C'est l'expression familière du propagateur des règles de Feynman dans un espace Euclidien.

Troisième partie

Champs de jauge de QCD sur réseau

Sommaire

3	Formulation de Wilson	26
4	Actions améliorées	28
5	La limite continue	29
6	Fixation de l'échelle	30

Rappelons que l'action pour les champs de jauge de QCD en espace Euclidien s'écrit

$$S_{YM} = \frac{1}{4} \int d^4x F_{\mu\nu}^a F_a^{\mu\nu}$$

Comme on l'a souligné dans l'introduction, les champs sont introduits pour permettre à la théorie de respecter l'invariance de jauge locale. C'est cette contrainte qui induit les interactions gluon-gluon et quark-gluon. Il est donc primordial que la discrétisation respecte exactement cette symétrie.

3 Formulation de Wilson

Dans la théorie continue la variable qui décrit les champs de jauge est le potentiel vecteur A_μ qui se transforme comme

$$A_\mu(x) \rightarrow G(x)(A_\mu(x) - ig\partial)G(x)^{-1}$$

lors d'une transformation de jauge définie par la matrice $G(x) \in SU(3)$. L'idée de Wilson est de remplacer la variable A_μ par la *variable de lien*

$$U(x, x + a\hat{\mu}) = P \exp(ig \int_x^{x+a\hat{\mu}} A_\mu(x) dx^\mu)$$

où P est le produit ordonné le long du lien $x \rightarrow x + a\hat{\mu}$. On utilisera parfois la notation

$$U_\mu(x) \equiv U(x, x + a\hat{\mu})$$

Elle se transforme comme

$$U(x, x + a\hat{\mu}) \rightarrow G(x)U(x, x + a\hat{\mu})G(x + a\hat{\mu})^{-1}$$

Il est facile de construire des objets invariants de jauge avec les variables de liens. Par exemple si l'on considère un chemin fermé comme sur la figure 6 et le produit matriciel appelé *plaquette* :

$$U(x, \mu, \nu) = U(x, x + a\hat{\nu})U(x + a\hat{\nu}, x + a\hat{\nu} + a\hat{\mu})U(x + a\hat{\nu} + a\hat{\mu}, x + a\hat{\mu})U(x + a\hat{\mu}, x)$$

on voit facilement que

$$U(x, \mu, \nu) \rightarrow G(x)U(x, \mu, \nu)G(x)^{-1}$$

Donc $\text{Tr } U(x, \mu, \nu)$ est invariant de jauge. Il en est de même pour la quantité

$$\bar{\psi}(x)U(x, x + a\hat{\nu})\psi(x + a\hat{\nu})$$

où ψ est le champ de quark. Ceci nous conduit à définir la dérivée covariante sur réseau vers l'avant

$$\nabla_\mu \psi(x) = \frac{1}{a} \left[U^{-1}(x, \mu) \psi(x + a\hat{\mu}) - \psi(x) \right] \quad (10)$$

et vers l'arrière

$$\nabla_\mu^* \psi(x) = -\frac{1}{a} \left[U(x - a\hat{\mu}, \mu) \psi(x - a\hat{\mu}) - \psi(x) \right] \quad (11)$$

La combinaison

$$\overleftrightarrow{\nabla}_\mu = \frac{\nabla_\mu + \nabla_\mu^*}{2}$$

tend vers la dérivée covariante continue D_μ lorsque a tend vers zéro, tout en préservant la nature anti-hermitienne de l'opérateur de Dirac.

Si on choisit $\bar{\psi} \gamma \cdot \overleftrightarrow{\nabla} \psi$ comme terme cinétique discrétisé, il sera invariant de jauge quelque soit a . On verra dans le prochain chapitre comment cette discrétisation des fermions dite *naïve* doit être modifiée pour éviter le fameux problème des *doubleurs*.

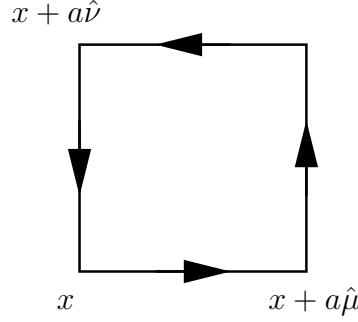


FIG. 6 – Une plaquette dans les directions μ, ν .

On peut utiliser la plaquette définie ci-dessus pour construire une action discrétisée invariante de jauge. En effet par un développement limité on vérifie facilement que l'action proposée pour les gluons par Wilson [131]

$$S_g = \sum_{\text{plaquettes}} \beta \left[1 - \frac{1}{3} \text{Re Tr } U(x, \mu, \nu) \right]$$

tend vers l'action continue S_{YM} si on identifie $\beta = 6/g^2$.

Dans ce formalisme, la valeur moyenne dans le vide d'un opérateur \mathcal{O} dans la théorie quantique est donné par

$$\langle \mathcal{O} \rangle = \frac{1}{Z} \int [dU] \mathcal{O} e^{-S_W}, \quad [dU] = \prod_{\text{liens } b} dU(b)$$

avec

$$Z = \int [dU] e^{-S_W}$$

La mesure d'intégration $[dU]$ du groupe $SU(N)$ qui est compact, est connue sous le nom de mesure invariante du groupe ou mesure de Haar. Aucune fixation de jauge n'est nécessaire si on calcule des quantités invariantes de jauge car le volume du groupe qui est fini est compensé par celui qui apparaît dans la constante Z . Les objets invariants de jauge sont de deux types : des champs de quarks reliés par un produit de liens, ou bien des traces de boucles fermées. Par contre pour le calcul de quantités non invariantes de jauge comme le propagateur du quark, il faut fixer la jauge comme en théorie des perturbations.



FIG. 7 – Rectangle.

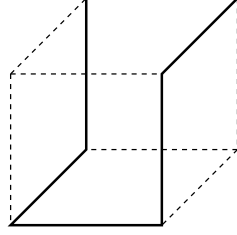


FIG. 8 – Parallélogramme.

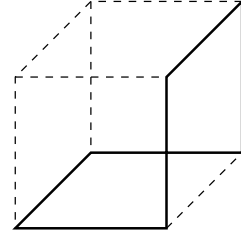


FIG. 9 – Chaise.

4 Actions améliorées

Il existe d'autres possibilités pour définir une action pour les gluons dont la limite quand a tend vers zéro redonne l'action de Yang-Mills. L'action de Wilson est la plus simple, mais on peut ajouter des traces de boucles fermées plus grandes que la plaquette, afin de diminuer les effets de discrétisation. Lors du développement limité de l'action de Wilson les premiers termes après le terme dominant sont d'ordre $O(a^6)$. La forme des boucles que l'on peut ajouter pour annuler ces termes d'ordre $O(a^6)$ sont montrées sur les figures en traits pleins 7, 8 et 9 où les traits en pointillés sont là pour guider l'oeil.

L'action améliorée dite tree-level de Symanzik [129] consiste à compenser les termes d'ordre a^6 dans une combinaison linéaire de la plaquette, notée $U_{x,\mu,\nu}^{1\times 1}$, et du rectangle, noté $U_{x,\mu,\nu}^{1\times 2}$. Elle s'écrit :

$$S_g = \frac{\beta}{3} \sum_x \left(\frac{5}{3} \sum_{\substack{\mu,\nu=1 \\ 1 \leq \mu < \nu}}^4 [1 - \text{Re Tr } U_{x,\mu,\nu}^{1\times 1}] - \frac{1}{12} \sum_{\substack{\mu,\nu=1 \\ \mu \neq \nu}}^4 [1 - \text{Re Tr } U_{x,\mu,\nu}^{1\times 2}] \right)$$

Une autre approche fondée le groupe de renormalisation a été utilisée en 1983 par Iwasaki [74] pour proposer une action qui inclut aussi une contribution des rectangles. L'idée est d'utiliser des transformations de blocage pour, en suivant le flot du groupe de renormalisation, se rapprocher de la trajectoire renormalisée. Après une transformation de blocage l'action proposée par Iwasaki est

$$S_g = \frac{\beta}{3} \sum_x \left(3.648 \sum_{\substack{\mu,\nu=1 \\ 1 \leq \mu < \nu}}^4 [1 - \text{Re Tr } U_{x,\mu,\nu}^{1\times 1}] - 0.331 \sum_{\substack{\mu,\nu=1 \\ \mu \neq \nu}}^4 [1 - \text{Re Tr } U_{x,\mu,\nu}^{1\times 2}] \right)$$

La formule générale qui paramétrise les actions de jauge utilisées par la collaboration ETM est

$$S_g = \frac{\beta}{3} \sum_x \left(c_0 \sum_{\substack{\mu,\nu=1 \\ 1 \leq \mu < \nu}}^4 [1 - \text{Re Tr } U_{x,\mu,\nu}^{1\times 1}] + c_1 \sum_{\substack{\mu,\nu=1 \\ \mu \neq \nu}}^4 [1 - \text{Re Tr } U_{x,\mu,\nu}^{1\times 2}] \right) \quad (12)$$

avec la normalisation $c_0 = 1 - 8c_1$. Pour $c_1 = 0$ on retrouve l'action de Wilson, pour $c_1 = -1/12$ on obtient l'action améliorée tree-level Symanzik et pour $c_1 = -0.331$ on a l'action de Iwasaki. Les simulations avec deux saveurs de quarks dégénérés $N_f = 2$ ont utilisé l'action tree-level Symanzik, celles où les quarks s et c ont été ajoutés $N_f = 2+1+1$ utilisent l'action d'Iwasaki.

5 La limite continue

Dans cette section nous nous limitons au cas de la théorie pure jauge sur réseau qui est plus simple car nous n'avons pas besoin de renormaliser la masse des quarks. Un traitement de la théorie complète avec quarks n'est pas fondamentalement différent et peut être trouvé dans [96].

Le contact avec l'expérience se fait dans la limite du continu c'est-à-dire lorsque la maille tend vers zéro. En pratique lors d'une simulation de QCD sur réseau on calcule des quantités comme les masses des particules en unités réseaux pour différentes valeurs de la constante de couplage g . Comme la constante de couplage et le pas du réseau sont implicitement reliés cela signifie que nous mesurons aussi les quantités pour différentes valeurs de a . Ensuite l'on fait une extrapolation pour a tendant vers 0.

Pour faire cette extrapolation nous devons savoir comment g varie en fonction de a . Les équations du groupe de renormalisation permettent de connaître la dépendance entre g et a . L'équation qui donne l'évolution de g est

$$-a \frac{\partial g}{\partial a} = \beta(g) = -\beta_0 g^3 - \beta_1 g^5 + \dots \quad (13)$$

où $\beta_0 = \frac{11}{3} \frac{N}{16\pi^2}$ et $\beta_1 = \frac{34}{3} (\frac{N}{16\pi^2})^2$. Ces deux coefficients peuvent être calculés en théorie continue des perturbations car ils sont universels, c'est-à-dire invariants de jauge et indépendants du schéma de régularisation, ce qui est expliqué dans la référence [96]. Le calcul de β_0 peut être trouvé dans [45] et pour β_1 dans [78]. Le signe moins devant le coefficient de g^3 est très important car il indique que la théorie est asymptotiquement libre.

La solution de l'équation (13) est

$$\begin{aligned} a &= \exp\left(-\int^g \frac{dg'}{\beta(g')}\right) \\ &= \Lambda_L^{-1} \exp\left(-\frac{1}{2\beta_0 g^2}\right) (\beta_0 g^2)^{-\frac{\beta_1}{2\beta_0^2}} (1 + O(g^2)) \end{aligned}$$

Dans la dernière équation Λ_L appelé Λ -paramètre du réseau est une constante d'intégration avec la dimension d'une masse et est définie par

$$\Lambda_L = \lim_{g \rightarrow 0} \frac{1}{a} \exp\left(-\frac{1}{2\beta_0 g^2}\right) (\beta_0 g^2)^{-\frac{\beta_1}{2\beta_0^2}}$$

En résolvant (13) avec comme inconnue g nous obtenons

$$g^2 = -\frac{1}{\beta_0 \log(a^2 \Lambda_L^2)} + \dots$$

ce qui prouve que, dans la limite du continu,

$$a \longrightarrow 0 \text{ quand } g \longrightarrow 0.$$

L'apparition d'une échelle de masse dans la théorie quantique alors que la théorie classique n'a pas d'échelle de masse est connue sous le nom de *transmutation dimensionnelle*.

Ainsi une observable qui a la dimension d'une masse à la puissance d est proportionnelle à Λ_L^d à la limite du continu. Par exemple pour une masse nous avons $m = C_m \Lambda_L$ où C_m est un coefficient sans dimension, ce qui conduit à

$$am \sim C_m \exp\left(-\frac{1}{2\beta_0 g^2}\right) (\beta_0 g^2)^{-\frac{\beta_1}{2\beta_0^2}} \text{ quand } g \rightarrow 0$$

Ceci montre l'origine non perturbative de la masse et ce comportement est appelé *asymptotic scaling*. Les rapports de masse se comportent comme

$$\frac{m_1}{m_2} = \frac{C_{m1}}{C_{m2}} (1 + O(a^2 m^2))$$

ce que l'on appelle *scaling* ou *loi d'échelle*.

6 Fixation de l'échelle

La limite continue d'un calcul sur réseau se fait en prenant la limite $a \rightarrow 0$ en imposant la valeur d'une observable physique. Les résultats doivent être indépendants du choix de l'observable de référence, ce qui laisse un certain arbitraire. Cependant toutes les observables ne sont pas équivalentes en raison de la difficulté pratique de leur évaluation. Par exemple si on choisit la masse du nucléon comme référence il est nécessaire d'extrapoler le résultat du calcul à la masse physique des quarks qui correspond à $m_\pi \simeq 139$ MeV. Comme les calculs actuels sont faits pour des valeurs de $m_\pi \gtrsim 300$ MeV cette extrapolation peut introduire une erreur systématique. On peut donc avoir intérêt à choisir une observable très facile à calculer. C'est le cas du paramètre r_0 dit *échelle de Sommer* [118] qui est défini par la solution de l'équation

$$r_0^2 \frac{\partial V(r)}{\partial r} \Big|_{r_0} = 1.65$$

où $V(r)$ est le potentiel entre un quark et un antiquark statiques. Ce potentiel est assez bien connu phénoménologiquement, ce qui permet d'établir l'échelle d'énergie $r_0 \simeq 0.5$ fm.

Le potentiel se calcule à partir de la boucle de Wilson $\mathcal{W}(r, T)$, c'est-à-dire la trace du produit ordonné des variables de liens le long d'un rectangle de côtés r, T . La valeur moyenne dans le vide est reliée au potentiel par

$$V(r) = - \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \log \langle \mathcal{W}(r, T) \rangle$$

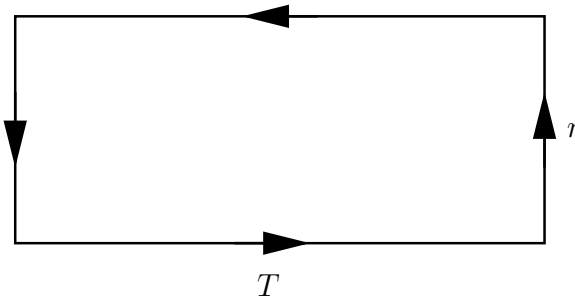


FIG. 10 – Exemple d'une boucle de Wilson $\mathcal{W}(r, T)$ (r, T en unités réseau).

D'autres quantités physiques peuvent servir à fixer l'échelle comme la constante de désintégration du pion f_π ou le spectre de certains mésons lourds. Un exemple concret est donné dans [35] et [36] par le spectre du $\Upsilon = b\bar{b}$.

Quatrième partie

Fermions sur le réseau

Sommaire

7	Fermions sur le réseau	33
7.1	Généralités	33
7.2	Problème des doubleurs et terme de Wilson	35
7.3	Symétrie chirale	37
7.4	Fermions de Ginsparg-Wilson	39
8	Twisted mass QCD	40
8.1	Le cas de deux saveurs légères dégénérées	40
8.2	Le cas non-dégénéré	42

7 Fermions sur le réseau

Dans ce chapitre nous détaillons le traitement des fermions sur réseau. Dans la première section nous utilisons un exemple pour introduire les notions de propagateur et de déterminant fermionique, qui seront utilisées très souvent par la suite. Cette partie est indépendante de la discrétisation choisie pour les fermions. Pour fixer les idées nous utilisons la discrétisation naïve qui consiste à remplacer les dérivées par des différences finies comme dans les équations (10) et (11).

Cette discrétisation naïve n'est pas utilisable en pratique comme expliqué dans la section 7.2 en raison du problème des doubleurs et nous présentons la solution proposée par Wilson [130]. La section suivante explique le conflit entre les fermions de Wilson et la symétrie chirale de QCD qui est une symétrie approchée mais fondamentale de QCD. La restauration de la symétrie implique l'ajustement de la masse nue des quarks à une valeur critique ce qui, d'une part augmente sévèrement la quantité de calcul et, d'autre part peut être délicat à réaliser en raison des modes nuls de l'équation de Dirac discrétisée.

Une solution attrayante présentée dans la section 7.4 est fournie par les fermions de type Ginsparg-Wilson pour lesquels il existe une symétrie chirale à chaque valeur de la maille du réseau. Ce type de fermions est très coûteux à simuler ce qui limite pour l'instant leur utilisation. Par contre, l'existence de la discrétisation de Ginsparg-Wilson est importante car elle est utilisée comme un intermédiaire [52] pour montrer que la limite continue des fermions de Wilson avec masse twistée est bien QCD.

Finalement dans la section 8 nous présentons la discrétisation que nous utilisons dans ce travail c'est-à-dire les fermions de Wilson avec masse twistée. Comme son nom l'indique cette discrétisation est basée sur celle de Wilson. En particulier elle brise explicitement la symétrie chirale mais la renormalisation nécessaire pour restaurer la symétrie est différente. Dans la formulation de Wilson c'est la différence entre la masse nue et la masse critique qui fixe la masse renormalisée des quarks (et donc la masse du pion). Dans la formulation twistée à twist maximum, c'est la masse nue non twistée qui est ajustée à la valeur critique et c'est la masse twistée qui fixe la masse renormalisée des quarks. Tant que celle-ci n'est pas nulle les modes nuls de l'équation de Dirac ne peuvent pas apparaître. L'avantage décisif de cette approche est que l'ajustement d'un seul paramètre (la masse critique) produit une amélioration automatique des erreurs de discrétisation qui se trouvent rejetées à l'ordre a^2 .

7.1 Généralités

Pour introduire les fermions dont les champs anticommulent, étudions le cas du calcul de la masse d'un méson comme le π^+ . L'expression complète de l'action euclidienne est

$$S[\psi, U] = S_g + \sum_{x,y} \sum_f \bar{\psi}_f(y) (i\gamma_\mu \overleftrightarrow{\nabla}_\mu + m_f)(x, y) \psi_f(x)$$

où f note la saveur. Le noyau $i\gamma_\mu \overleftrightarrow{\nabla}_\mu + m_f$ est une matrice dans l'espace de Dirac, de couleur et de position en raison de la discrétisation. On suppose ici le réseau infini pour simplifier la discussion.

On sait (voir section 1 équation (7)) que la masse peut être extraite du corrélateur $C(t)$:

$$C(t) = \langle T \Pi^\dagger(t) \Pi(0) \rangle$$

où le *champ interpolant* $\Pi(t)$ est défini par

$$\Pi(t) = \sum_{\vec{x}} \bar{\psi}_u(t, \vec{x}) \gamma_5 \psi_d(t, \vec{x})$$

où ψ_u et ψ_d sont les champs des quarks u et d définis sur les sites du réseau hypercubique. Il crée une particule d'impulsion nulle avec les nombres quantiques du pion. Quand t devient grand $C(t) \sim \exp(-m_\pi t)$. L'intégrale de chemin pour ce corrélateur est :

$$C(t) = \frac{1}{Z} \int \prod_f [d\bar{\psi}_f][d\psi_f][dU] \Pi^\dagger(t) \Pi(0) e^{-S[\psi, U]}$$

La justification de cette expression et les règles d'intégration sur les champs fermioniques peuvent être trouvées dans [128]. L'appendice 28 rassemble les résultats utiles. Les variables d'intégration fermioniques sont des variables de Grassman qui anticommulent et aucune tentative d'intégration sur ordinateur n'a donné de résultats concrets. Heureusement la nature bilinéaire du lagrangien autorise l'intégration analytique sur les variables fermioniques. Les règles d'intégration donnée dans l'appendice 28 permettent d'écrire :

$$C(t) = \frac{1}{Z} \sum_{\vec{x}, \vec{y}} \int [dU] \det(\gamma \cdot \overleftrightarrow{\nabla} + M) \text{Tr}[\gamma_5 S_u((t, \vec{x}), (0, \vec{y})) \gamma_5 S_d((0, \vec{y}), (t, \vec{x}))] e^{-S[\psi, U]}$$

où S_q ($q=u,d$) est le propagateur du quark dans le champ de jauge U . Il est solution de l'équation :

$$(\gamma \cdot \overleftrightarrow{\nabla} + M)(x, y) S(y, z) = \delta^4(x, z) \quad (14)$$

L'évaluation du déterminant étant coûteuse on utilise parfois *l'approximation quenched*, c'est-à-dire $\det(\gamma \cdot \overleftrightarrow{\nabla} + M) = 1$ au moins pour certaines saveurs. Si on utilise cette approximation pour toutes les saveurs on parle de simulation quenched ou $N_f = 0$. Ceci revient à négliger la contribution des paires de quark-antiquark. Les configurations de la collaboration ETM sur lesquelles nous avons travaillé au début comprenaient 2 saveurs de quarks dégénérés dans le déterminant c'est-à-dire $N_f = 2$. Puis nous avons participé à la production de configurations avec 4 saveurs (u et d dégénérés, s et c non dégénérés) c'est-à-dire $N_f = 2 + 1 + 1$.

La taille de la matrice qui est de $12N \times 12N$ où N est le nombre de points du réseau, typiquement de l'ordre de 10^6 , rend l'évaluation directe du déterminant impossible. Pour le calculer, on le réexprime en utilisant une intégrale de chemin sur des champs bosoniques ϕ dits *pseudofermions*, comme expliqué dans la section 9. En pratique en plus des variables de liens U , la simulation comportera donc de nouveaux champs ϕ .

Lors du calcul des propagateurs, il est possible de faire une approximation dite *partially quenched*. Cela consiste à utiliser une masse différente dans l'opérateur de Dirac pour le calcul des propagateurs et dans l'opérateur de Dirac qui entre dans le déterminant. Ainsi sur les configurations $N_f = 2$, il est possible de calculer le propagateur d'un quark s en inversant l'opérateur de Dirac qui contient la masse nue du quark s. On peut alors construire des champs interpolants pour étudier les baryons étranges où le quark s apparaît uniquement comme quark de valence.

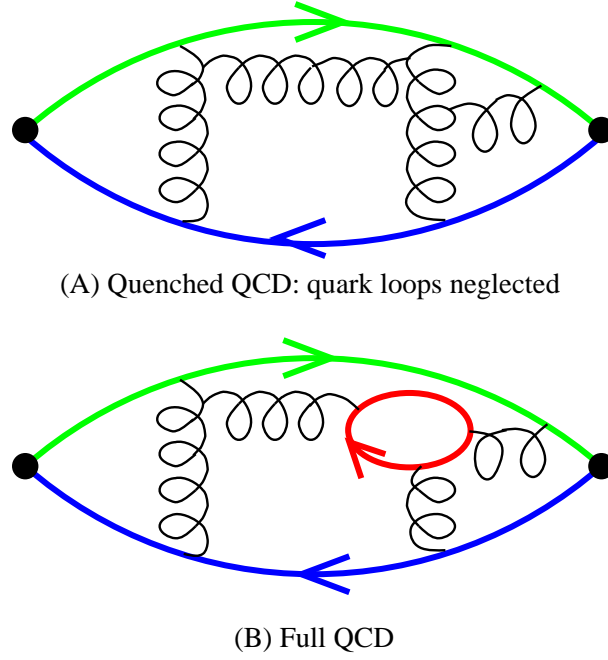


FIG. 11 – Illustration des différences entre quenched et full QCD.

7.2 Problème des doubleurs et terme de Wilson

Pour expliquer le problème on peut négliger l'interaction entre les quarks et les gluons ce qui revient à mettre toutes les variables de liens à l'identité. Si on calcule le propagateur défini par l'équation (14) dans l'espace des impulsions de façon analogue au cas scalaire on trouve pour chaque saveur, m étant une masse générique :

$$\tilde{S}(p) = \frac{m - \frac{i}{a} \sum_{\mu} \gamma_{\mu} \sin(ap_{\mu})}{m^2 + \frac{1}{a^2} \sum_{\mu} \sin^2(ap_{\mu})}$$

Tout semble correct car dans la limite du continu ($a \rightarrow 0$)

$$\tilde{S}(p) \sim \frac{m - i \sum_{\mu} \gamma_{\mu} p_{\mu}}{m^2 + p^2}$$

et nous avons un pôle pour $p^2 = -m^2$ décrivant une particule de Dirac. Le développement ci-dessus a été fait pour $ap_{\mu} \rightarrow 0$, mais nous pouvons aussi développer le sinus au voisinage des bords de la zone de Brillouin. Pour cela, introduisons quinze vecteurs

$$V_i \in \{(0, 0, 0, \pi), (0, 0, \pi, 0), (0, 0, \pi, \pi) \dots (\pi, \pi, \pi, \pi)\}$$

et écrivons $ap_{\mu} = V_{i\mu} + ak_{\mu}$. Maintenant $ak_{\mu} \rightarrow 0$ et nous trouvons que le dénominateur s'écrit $m^2 + k^2 + O(a^2)$ ce qui donne un pôle pour chaque V_i . Le propagateur ne décrit donc pas une mais $2^4 = 16$ particules. Ce phénomène appelé *fermion doubling* serait inoffensif dans le cas libre. Par contre en présence d'interactions les doubleurs vont se mélanger et la théorie ainsi simulée n'est pas QCD.

Une autre façon de voir ce phénomène est de tracer la relation énergie-impulsion comme montré sur la figure 12 dans le cas d'une masse nulle. On voit que le doubleur, d'impulsion π/a , est dégénéré avec celui d'impulsion nulle, alors que dans le cas continu,

il aurait une énergie beaucoup plus grande. Ce problème, typique des particules de spin demi-entier, est lié au fait que l'équation de Dirac est du premier ordre dans les dérivées. Le problème n'apparaît pas pour les particules de spin entier car l'équation est du second ordre et le doubleur est en dehors de la première zone de Brillouin.

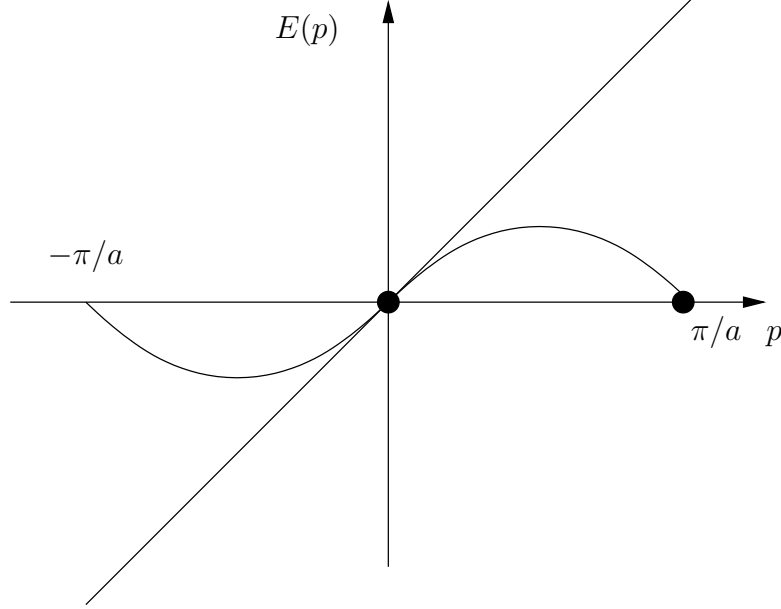


FIG. 12 – Relation énergie-impulsion dans le cas continu (ligne droite) et le cas discret (sinus). Le point $-\pi/a$ ne fait pas parti de la zone de Brillouin.

La proposition de Wilson [130] pour se débarrasser des doubleurs et d'ajouter à l'action naïve un terme qui ne contribue pas à la limite du continu et qui rend les doubleurs infiniment massifs. Ce terme est

$$-\frac{a^5}{2}\bar{\psi}(x)\sum_{\mu}\nabla_{\mu}^*\nabla_{\mu}\psi(x) \quad (15)$$

Nous obtenons ainsi un nouveau terme dans le propagateur

$$\tilde{S}(p) = \frac{E(p) - \frac{i}{a}\sum_{\mu}\gamma_{\mu}\sin(ap_{\mu})}{E(p)^2 + \frac{1}{a^2}\sum_{\mu}\sin^2(ap_{\mu})}$$

où $E(p) = m + \frac{1}{a}\sum_{\mu}(1 - \cos(ap_{\mu}))$

Le développement avec $ap_{\mu} \rightarrow 0$ donne le même résultat que précédemment. Mais la situation est complètement différente sur les bords de la zone de Brillouin. En écrivant de nouveau $ap_{\mu} = V_{i\mu} + ak_{\mu}$ le dénominateur se comporte comme

$$(m + 2\frac{n_{\pi}}{a})^2 + k^2 + O(a)$$

où n_{π} est le nombre de π dans V_i . Il en résulte que les quinze fermions non désirés acquièrent une masse proportionnelle à l'inverse du pas du réseau a et deviennent infiniment massifs à la limite du continu se découplant ainsi du reste.

En résumé la partie fermionique de l'action de Wilson est

$$S_{F,W} = a^4 \sum_x \bar{\psi}(x) \left[\gamma_\mu \overleftrightarrow{\nabla}_\mu + m - \frac{a}{2} \sum_\mu \nabla_\mu^* \nabla_\mu \right] \psi(x)$$

ce qui peut se réécrire sous la forme traditionnelle

$$\sum_x \left\{ \bar{\psi}(x) \psi(x) - \kappa \sum_\mu \bar{\psi}(x) \left[U(x; \mu) (1 - \gamma_\mu) \psi(x + \hat{\mu}) + U(x - \hat{\mu}; \mu)^{-1} (1 + \gamma_\mu) \psi(x - \hat{\mu}) \right] \right\}$$

avec

$$\kappa = \frac{1}{8 + 2am}$$

appelé *hopping parameter* et les changements d'échelle

$$\psi \rightarrow \frac{\sqrt{2\kappa}}{a^{3/2}} \psi, \quad x \rightarrow ax.$$

7.3 Symétrie chirale

La chromodynamique quantique possède une symétrie globale approchée due au fait que les masses des quarks u et d sont petites par rapport à une masse hadronique typique. Définissons les spineurs droits et gauches :

$$\psi_R = \frac{1 + \gamma_5}{2} \psi, \quad \psi_L = \frac{1 - \gamma_5}{2} \psi$$

et les transformations :

$$\begin{pmatrix} \psi_u \\ \psi_d \end{pmatrix}_R \rightarrow e^{i\vec{\omega}_R \cdot \vec{\tau}} \begin{pmatrix} \psi_u \\ \psi_d \end{pmatrix}_R \quad \begin{pmatrix} \psi_u \\ \psi_d \end{pmatrix}_L \rightarrow e^{i\vec{\omega}_L \cdot \vec{\tau}} \begin{pmatrix} \psi_u \\ \psi_d \end{pmatrix}_L$$

où les matrices $\vec{\tau}$ sont les matrices de Pauli agissant dans l'espace de saveur des quarks u, d et $\vec{\omega}_{R,L}$ sont des paramètres réels. L'ensemble de ces transformations forment un groupe $SU(2)_R \times SU(2)_L$ dit groupe chirale et on vérifie facilement que l'action continue de QCD est invariante sous ce groupe lorsque l'on néglige les masses m_u et m_d . Cette symétrie est réalisée par la nature dans le mode de Goldstone, c'est-à-dire que le vide n'est pas invariant sous toutes les transformations du groupe. Seules les transformations correspondant à $\omega_R = \omega_L$, qui forment un sous-groupe $SU(2)_V$, ou groupe d'isospin laissent le vide invariant. Par contre sous les transformations $\{Q_A^a, a = 1, 3\}$ du sous-groupe $SU(2)_A$ correspondant à $\omega_R = -\omega_L$ on a

$$Q_A^a |0\rangle \neq |0\rangle.$$

Par le théorème de Goldstone il existe trois modes de masse nulle qu'on identifie aux trois pions π^+, π^0, π^- . La validité de l'approximation est quantifiée par la comparaison de la masse des pions ~ 140 MeV à celle d'un hadron typique ~ 1 GeV. Les conséquences de cette symétrie sont les théorèmes de pion mou, c'est-à-dire un pion d'impulsion et de masse nulle, qui relie les amplitudes avec un pion mou à l'amplitude élastique

$$\langle f, \pi(\text{mou}) | T | i \rangle \rightarrow \langle f | T | i \rangle$$

La vérification de ces théorèmes de pions mous a été l'objet d'une intense activité phénoménologique avant même la découverte de QCD [106]. Il en ressort que globalement le désaccord avec les prédictions est compatible avec la brisure attendue de l'ordre de $\frac{140}{1000} = 14\%$. Pour que les calculs sur réseau correspondent à la réalité il faut qu'ils respectent cette symétrie aux termes de masse près. Le problème du terme de Wilson est qu'il brise explicitement la symétrie chirale pour $a \neq 0$. Pour compenser cet artefact il est nécessaire d'ajuster la masse nue des quarks u,d pour que la divergence du courant axial s'annule au sens d'un élément de matrice. En pratique, il suffit de le faire pour un élément de matrice entre le pion et le vide. Ceci revient à une renormalisation additive de la masse des quarks qui doit être faite pour chaque changement des paramètres de simulation. On reviendra plus en détail sur ce problème dans la section 8 sur les masses twistées.

Si l'on pouvait négliger la masse du quark s, alors QCD posséderait une symétrie chirale $SU(3)_R \times SU(3)_L$ avec huit bosons de Goldstone $\{\pi^+, \pi^0, \pi^-, K^0, \bar{K}^0, K^+, K^-, \eta\}$. Expérimentalement cette symétrie est une approximation grossière comme en témoigne la grande masse des K et du η .

Si les quarks u et d étaient sans masse le lagrangien serait aussi invariant sous les transformations axiales $U_A(1)$

$$\begin{pmatrix} \psi_u \\ \psi_d \end{pmatrix} \rightarrow e^{-i\theta\gamma_5} \begin{pmatrix} \psi_u \\ \psi_d \end{pmatrix}$$

Cette symétrie approchée au niveau classique est brisée au niveau quantique, c'est ce qui explique pourquoi il n'y a pas un quatrième boson de Goldstone comme on pourrait s'y attendre a priori. Ce phénomène appelé *anomalie* du courant axial est due à la non invariance de la mesure fermionique dans l'intégrale de chemin [55]. Historiquement cette anomalie a été découverte dans le contexte perturbatif par Adler-Bell-Jackiw [1]. Le diagramme ci-dessous appartient à une classe de diagrammes qui contribue à l'anomalie. Le calcul détaillé sur des diagrammes similaires est fait dans la référence [9]. L'anomalie

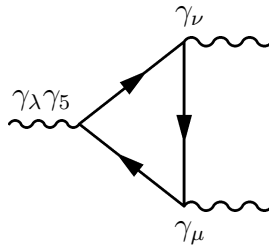


FIG. 13 – Diagramme de Feynman en triangle.

est essentielle pour interpréter le taux de désintégration de π^0 en $\gamma\gamma$.

L'importance de la symétrie chirale non seulement pour QCD, mais surtout pour les théories de jauge chirales a suscité un grand nombre de tentatives pour trouver une discrétisation sans doubleurs qui respecte cette symétrie. Une étape importante a été la démonstration du théorème No-Go de Nielsen-Ninomiya [100, 102, 101] qui est résumé ci-dessous

Soit l'action libre pour des fermions sur réseau suivante (\mathcal{D} est bilinéaire et hermi-

tion)

$$S = a^4 \sum_{x \in \Lambda} \bar{\psi}(x) \mathcal{D}(x, y) \psi(x)$$

et les conditions

1. $\mathcal{D}(x, y)$ est local
2. Pour $p_\mu \ll \frac{\pi}{a}$ $\mathcal{D}(p) = i\gamma_\mu p_\mu + O(ap^2)$
3. $\mathcal{D}(p)$ est inversible pour toutes les impulsions non nulles (pas de doubleurs sans masse)
4. \mathcal{D} anticommute avec γ_5 (origine de la symétrie chirale)

Le théorème affirme que les conditions 1, 2, 3, 4 ne peuvent être satisfaites simultanément.

Comme on refuse d'abandonner les conditions 1, 2, 3, il faut abandonner la quatrième condition.

7.4 Fermions de Ginsparg-Wilson

La seule façon de contourner le théorème no-go est donc de ne pas satisfaire la condition 4. En 1982, Ginsparg et Wilson ont trouvé, dans un autre contexte [62], une condition suffisante pour avoir une symétrie chirale :

$$\{\gamma_5, \mathcal{D}\} = \gamma_5 \mathcal{D} + \mathcal{D} \gamma_5 = a \mathcal{D} \gamma_5 \mathcal{D}.$$

Cette relation dite de Ginsparg-Wilson est moins contraignante que la relation nécessaire pour avoir la symétrie chirale dans le continu

$$\{\gamma_5, \mathcal{D}\} = 0.$$

La relation de Ginsparg-Wilson garantit une symétrie chirale exacte sur le réseau même à maille non nulle. Elle correspond aux transformations axiales infinitésimales

$$\delta\psi(x) = \omega\gamma_5(1 - \frac{1}{2}a\mathcal{D})\psi(x), \quad \delta\bar{\psi}(x) = \omega\bar{\psi}(x)(1 - \frac{1}{2}a\mathcal{D})\gamma_5 \quad \omega \ll 1.$$

Cette relation a été oubliée pendant près de quinze ans, jusqu'à ce que l'on trouve explicitement des opérateurs de Dirac satisfaisant cette identité. Une des solutions a été trouvée par Neuberger et Narayanan [98, 99] et donne naissance aux fermions de Neuberger aussi appelés *overlap*. La solution pour \mathcal{D} est

$$\mathcal{D} = \frac{1}{a} \left[1 - \frac{A}{\sqrt{A^\dagger A}} \right]$$

avec $A = 1 - a\mathcal{D}_W$ et $\mathcal{D}_W = \gamma_\mu \overleftrightarrow{\nabla}_\mu + m - \frac{a}{2} \sum_\mu \nabla_\mu^* \nabla_\mu$.

Un autre solution, appelée *domain wall*, a été proposé par Kaplan [80] et nécessite l'introduction d'une cinquième dimension. Quand celle-ci tend vers l'infini on retrouve la formulation *overlap*.

Le principal désavantage des fermions de type Ginsparg-Wilson est qu'ils sont très coûteux à simuler, environ 100 fois plus coûteux que les fermions de Wilson par exemple. Cependant ce domaine est actuellement un champ de recherche actif et des progrès peuvent être attendus.

8 Twisted mass QCD

8.1 Le cas de deux saveurs légères dégénérées

Nous allons dans cette sous-section nous limiter au cas de deux saveurs légères dégénérées u et d. L'essentiel des résultats présentés dans cette thèse correspond à cette approximation. Pour introduire les fermions twistés nous considérons d'abord la théorie dans la limite du continu. Nous notons χ les champs de fermions dits *dans la base twistée* en terme desquels l'action fermionique euclidienne dite *tmQCD* s'écrit

$$S_{F,TM}[\chi, U] = \int d^4x \bar{\chi} (\gamma_\mu D_\mu + m + i\mu\gamma_5\tau^3) \chi$$

où μ est appelé *masse twistée* et τ^3 est la matrice de Pauli qui agit dans l'espace des saveurs u,d. Notons que m et μ sont des paramètres nus. On a

$$m + i\mu\gamma_5\tau^3 = \bar{m}e^{i\omega\gamma_5\tau^3}$$

avec $\bar{m} = \sqrt{m^2 + \mu^2}$ et $\tan(\omega) = \frac{\mu}{m}$. Si l'on effectue le changement de variables

$$\psi = \exp(i\gamma_5\frac{\omega}{2}\tau^3)\chi, \quad \bar{\psi} = \bar{\chi} \exp(i\gamma_5\frac{\omega}{2}\tau^3) \quad (16)$$

on obtient

$$S_{F,TM}[\chi, U] = S_F[\psi, U] = \int d^4x \bar{\psi} (\gamma_\mu D_\mu + \bar{m}) \psi$$

Comme la mesure d'intégration fermionique est invariante sous les transformations (16), on peut conclure que formellement les prédictions de *tmQCD* sont équivalentes à celles de QCD. Notons que cette équivalence utilise le fait que l'opérateur $\gamma \cdot D$ commute avec γ_5 . Le terme de Wilson (15), nécessaire pour éliminer les doubleurs, n'a pas cette propriété sauf dans la limite $a = 0$. On peut donc s'attendre à ce que la théorie discrétisée avec masse twistée ait une approche de la limite continue différente de celle avec masse non twistée.

On appelle *base physique* $[\psi, \bar{\psi}]$ la base dans laquelle la théorie continue QCD prend sa forme standard. Dans la suite nous utiliserons principalement la base twistée car c'est elle qui est employée dans les simulations numériques. Nous utiliserons des lettres calligraphiées pour désigner les opérateurs dans la base physique et normales pour la base twistée. Dans la base twistée les courants axial et vectoriel sont

$$A_\mu^a = \bar{\chi} \gamma_\mu \gamma_5 \frac{\tau^a}{2} \chi, \quad V_\mu^a = \bar{\chi} \gamma_\mu \frac{\tau^a}{2} \chi,$$

et les densités pseudoscalaire et scalaire

$$P^a = \bar{\chi} \gamma_5 \frac{\tau^a}{2} \chi, \quad S^0 = \bar{\chi} \chi.$$

Avec les transformations (16) on obtient pour les courants dans la base physique

$$\begin{aligned} \mathcal{A}_\mu^a &\equiv \bar{\psi} \gamma_\mu \gamma_5 \frac{\tau^a}{2} \psi = \begin{cases} \cos(\omega) A_\mu^a + \varepsilon^{3ab} \sin(\omega) V_\mu^b & (a = 1, 2), \\ A_\mu^3 & (a = 3), \end{cases} \\ \mathcal{V}_\mu^a &\equiv \bar{\psi} \gamma_\mu \frac{\tau^a}{2} \psi = \begin{cases} \cos(\omega) V_\mu^a + \varepsilon^{3ab} \sin(\omega) A_\mu^b & (a = 1, 2), \\ V_\mu^3 & (a = 3), \end{cases} \end{aligned} \quad (17)$$

et pour les densités

$$\mathcal{P}^a \equiv \bar{\psi} \gamma_5 \frac{\tau^a}{2} \psi = \begin{cases} P^a & (a = 1, 2), \\ \cos(\omega) P^3 + i \sin(\omega) \frac{1}{2} S^0 & (a = 3), \end{cases} \quad (18)$$

$$\mathcal{S}^0 \equiv \bar{\psi} \psi = \cos(\omega) S^0 + 2i \sin(\omega) P^3.$$

Pour des opérateurs plus compliqués comme les champs interpolants des baryons (section 15) on peut dériver des relations similaires. La forme des identités de Ward pour les courants dans la base twistée est aussi modifiée. Les relations de conservation partielle du courant axial (PCAC) et du courant vectoriel (PCVC) deviennent

$$\partial_\mu A_\mu^a = 2m P^a + i\mu \delta^{3a} S^0, \quad (19)$$

$$\partial_\mu V_\mu^a = -2\mu \varepsilon^{3ab} P^b.$$

Il est facile de vérifier que dans la base physique on retrouve la forme standard [18]

$$\partial_\mu \mathcal{A}_\mu^a = 2\bar{m} \mathcal{P}^a, \quad \partial_\mu \mathcal{V}_\mu^a = 0.$$

Comme nous l'avons remarqué plus haut il y a une équivalence formelle entre $tmQCD$ et QCD. De façon plus précise les fonctions de corrélation dans la base physique

$$\langle \mathcal{O}[\psi] \rangle = \mathcal{Z}^{-1} \int [dU] [d\psi d\bar{\psi}] \mathcal{O}[\psi] e^{-S_{QCD}}$$

et celles dans la base twistée

$$\langle \mathcal{O}[\chi] \rangle = Z^{-1} \int [dU] [d\chi d\bar{\chi}] \mathcal{O}[\chi] e^{-S_{tmQCD}}$$

sont reliées par

$$\langle \mathcal{O}[\psi] \rangle_{QCD} = \langle \mathcal{O}[\chi] \rangle_{tmQCD} \quad (20)$$

si

$$\mathcal{O}[\chi] = \mathcal{O}[\psi = \exp(i\mu\gamma_5 \frac{\omega}{2} \tau^3) \chi]$$

Par exemple en se servant de (17) et (18)

$$\langle \mathcal{A}_\mu^1(x) \mathcal{P}^1(y) \rangle_{QCD} = \cos \omega \langle A_\mu^1(x) P^1(y) \rangle_{tmQCD} + \sin \omega \langle V_\mu^2(x) P^1(y) \rangle_{tmQCD}$$

c'est-à-dire que les fonctions de corrélation de QCD peuvent s'écrire comme des combinaisons linéaires de fonctions de corrélation de $tmQCD$.

Cette équivalence reste valable pour la théorie discrétisée aux erreurs de discrétisation près, si elle est renormalisée dans un schéma indépendant de la masse des quarks. Dans le contexte non-perturbatif qui est le notre cela est réalisé en pratique en ajustant la masse nue m à la valeur critique m_{cr} pour que la masse PCAC définie par

$$m_{PCAC} = \frac{\langle \partial_0 A_0^a(x) P^a(0) \rangle}{2 \langle P^a(x) P^a(0) \rangle} \quad a=1,2$$

soit égale à zéro. En pratique, c'est $\kappa = 1/(8 + 2am)$ que l'on ajuste sa valeur critique. Comme $a=1,2$ on voit sur l'équation (19) que c'est la masse non twistée qui est ajustée.

Cette renormalisation additive de la masse est analogue au cas des fermions de Wilson. La démonstration formelle [52] de l'équivalence (20) exploite l'existence d'une discrétisation de Ginsparg-Wilson (section 7.4) qui préserve la symétrie chirale pour a fini. La forme fonctionnelle des relations entre fonctions de corrélation QCD et $tmQCD$ après l'ajustement de la masse nue m reste la même que dans le cas classique et correspond à un angle $\omega = \frac{\pi}{2}$. Cette valeur a le nom d'angle de *twist maximum*. De façon plus générale l'angle de twist renormalisé s'écrirait

$$\tan(\omega) = \frac{Z_\mu}{Z_m} \frac{\mu}{m - m_{cr}}$$

où Z_μ et Z_m sont les constantes de renormalisation des masses, c'est-à-dire

$$m_R = Z_m(m - m_{cr}), \quad \mu_R = Z_\mu \mu$$

A twist maximum ($m_R = 0$) la masse renormalisée $\bar{m}_R = \sqrt{m_R^2 + \mu_R^2}$ ne dépend donc que de la masse twistée μ_R . L'avantage de se mettre à twist maximum est qu'on n'a pas besoin de calculer les constantes de renormalisation Z_μ et Z_m .

Le grand avantage des quarks twistés à twist maximum est que les erreurs de discrétisation de la plupart des observables sont d'ordre $O(a^2)$. c'est-à-dire que par l'ajustement d'un seul paramètre on réalise de façon non perturbative le programme d'amélioration de Symanzik [119, 120]. De façon plus précise ce sont les corrélateurs pairs qui sont automatiquement améliorés à l'ordre $O(a^2)$, ce qui est évidemment le cas pour les corrélateurs servant à calculer les masses. Le prix à payer est la brisure explicite de la parité et de la symétrie d'isospin, mais ces brisures sont d'ordre $O(a^2)$ [49] et disparaissent dans la limite du continu.

En général l'effet de cette brisure est faible pour les valeurs de a que nous utilisons comme on peut le constater dans le chapitre VII. La seule exception concerne le pion pour lequel $m_\pi^\pm - m_\pi^0$ contient une contribution d'ordre a^2 qui est exceptionnellement grande [51]. Notons que le corrélateur du pion neutre contient des diagrammes déconnectés, c'est-à-dire où certaines lignes de quarks ne sont connectées aux autres que par les gluons, ce qui rend leur évaluation notoirement difficile. C'est pourquoi on utilise les pions chargés pour étudier la variation des observables en fonction de la masse du pion.

Le critère employé pour juger du réglage de κ à sa valeur critique est que la masse PCAC ainsi que son erreur soient inférieures à un dixième de la valeur de la masse twistée nue du secteur léger. Comme expliqué dans [20] on s'attend à ce que cette condition conduise à un bon comportement des quantités physiques vis-à-vis des lois d'échelle. Ce même article montre également que l'on peut se contenter de régler le κ à sa valeur critique pour la valeur minimale de μ . En pratique les erreurs de discrétisation $O(a)$ que cette approximation entraîne sont tolérables étant donné le gain en temps calcul.

8.2 Le cas non-dégénéré

On présente maintenant le cas non-dégénéré en vue de l'introduction des quarks s et c . Un choix possible [108] est d'écrire l'action pour quatre saveurs de quarks sous la forme

$$S_F[\chi, U] = \int d^4x \bar{\chi}(\gamma_\mu D_\mu + \mathbf{m} + i\boldsymbol{\mu}\gamma_5)\chi \quad (21)$$

où maintenant χ regroupe les quatre saveurs de quarks $\chi^T = (u, d, s, c)$ et les matrices de masse ont la forme

$$\mathbf{m} = \begin{pmatrix} m_u & 0 & 0 & 0 \\ 0 & m_d & 0 & 0 \\ 0 & 0 & m_s & 0 \\ 0 & 0 & 0 & m_c \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} M_u \cos \omega_l & 0 & 0 & 0 \\ 0 & M_d \cos \omega_l & 0 & 0 \\ 0 & 0 & M_s \cos \omega_h & 0 \\ 0 & 0 & 0 & M_c \cos \omega_h \end{pmatrix},$$

$$\boldsymbol{\mu} = \begin{pmatrix} \mu_u & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \mu_d & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \mu_s & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \mu_c \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} M_u \sin \omega_l & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -M_d \sin \omega_l & 0 & 0 \\ 0 & 0 & M_s \sin \omega_h & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -M_c \sin \omega_h \end{pmatrix}.$$

Néanmoins les algorithmes utilisés actuellement pour la réalisation des simulations et qui sont détaillés dans le chapitre V utilisent le fait que le déterminant qui apparaît lorsque l'on intègre sur les champs de fermions est réel et positif. Pour qu'une action comme celle présentée ci-dessus satisfasse cette condition il faudrait que les quarks s et c soient dégénérés, ce qui est une approximation trop lointaine de la réalité physique.

C'est donc un autre choix [50] qui a été adopté pour introduire un doublet non-dégénéré noté χ^h de quarks lors des simulations $N_f = 2 + 1 + 1$. Il consiste en l'ajout, pour le secteur lourd, d'un terme de masse de la forme

$$S_h[\chi, U] = \int d^4x \bar{\chi}^h (m + i\gamma_5 \tau^1 \mu_\sigma + \tau^3 \mu_\delta) \chi^h \quad (22)$$

Notons que la place de τ^3 a changé par rapport au cas dégénéré. La masse non-twistée m (ou κ) est choisie égale à celle des quarks légers qui a été ajustée pour annuler la masse PCAC. Les masses des quarks étrange et charme sont alors fixées en ajustant les paramètres μ_σ et μ_δ sur les masses des mésons étranges et charmés [28, 11]. En choisissant la même valeur de κ pour le secteur lourd s et c , on garantit aussi l'amélioration à l'ordre $O(a)$ dans ce secteur [50].

La positivité du déterminant n'est pas garantie pour n'importe quel choix de μ_σ et μ_δ , mais en pratique les configurations de jauge pour lesquelles cela se produit ont un poids négligeable [28]. A la différence du cas $N_f = 2$, l'ajustement du κ critique s'effectue maintenant pour chaque valeur de μ car les moyens de calcul disponibles actuellement le permettent. Des exemples concrets de choix de κ critique sur les divers ensembles pour $N_f = 2 + 1 + 1$ seront montrés dans la partie VI consacrée à la production des configurations de jauge.

Cinquième partie

Partie algorithmique et informatique

Sommaire

9	Résumé du problème	45
10	Algorithmes et méthodes numériques	46
10.1	Méthodes Monte Carlo	46
10.2	Nombres aléatoires	48
10.3	Algorithme de Metropolis	49
10.4	HMC	49
10.5	Polynomial HMC	50
10.6	Résolution de systèmes linéaires	51
11	Code tmLQCD	52
11.1	Description	53
11.2	Erreurs courantes	54
12	Les machines	55
12.1	L'utilisation du parallélisme	55
12.2	L'architecture BlueGene	57
12.2.1	Introduction	57
12.2.2	Placement des processus	58
12.2.3	Scalabilité	61

9 Résumé du problème

L'action fermionique pour les fermions twistés est

$$\begin{aligned}
S_{F,TM} &= \sum_x \left\{ \bar{\chi}(x) \left[1 + 2i\kappa a \mu \gamma_5 \tau^3 \right] \chi(x) \right. \\
&\quad \left. - \kappa \sum_{\mu} \bar{\chi}(x) \left[U(x; \mu) (1 - \gamma_{\mu}) \chi(x + \hat{\mu}) + U(x - \hat{\mu}; \mu)^{-1} (1 + \gamma_{\mu}) \chi(x - \hat{\mu}) \right] \right\} \\
&= \sum_{x,y} \bar{\chi}(x) \mathcal{D}(U)(x,y) \chi(y)
\end{aligned} \tag{23}$$

et la partie gluonique sera notée S_g , l'action totale étant $S = S_g + S_{F,TM}$.

Les observables à calculer en QCD sur réseau peuvent se mettre sous la forme générique

$$\langle O[U, \chi, \bar{\chi}] \rangle \equiv \langle O \rangle = \frac{1}{Z} \int [dU] [d\chi d\bar{\chi}] P(U)_{a,b,\dots,a',b',\dots} \chi_a \chi_b \dots \bar{\chi}_{a'} \bar{\chi}_{b'} \dots e^{-S_{tmQCD}}$$

où $P(U)_{a,b,\dots,a',b',\dots}$ est un coefficient contenant la structure de l'opérateur. Les indices $a, b, \dots, a', b', \dots$ sont une notation compacte pour les indices de Dirac, de couleur, de saveur et de position.

L'intégration sur les champs de fermions conduit à

$$\langle O \rangle = \frac{1}{Z} \int [dU] \left[(-1)^{\epsilon} P(U)_{a,b,\dots,a',b',\dots} S(U)_{aa'} S(U)_{bb'} \dots + \text{permutations} \right] \det \mathcal{D}(U) e^{-S_g} \tag{24}$$

où S est le propagateur défini par l'équation

$$\mathcal{D}(U)_{ab} S(U)_{bc} = \delta_{ac}$$

et ϵ est la parité de la permutation des champs de fermions.

Si on se restreint au cas de deux saveurs de quarks dégénérées $N_f = 2$, le déterminant peut se réexprimer à l'aide des pseudofermions ϕ suivant

$$\det \mathcal{D}(U) = \int [d\phi d\bar{\phi}] e^{-\bar{\phi} [\mathcal{D}_u(U)^{\dagger} \mathcal{D}_u(U)]^{-1} \phi} \tag{25}$$

où $\mathcal{D}_u(U)$ est la restriction de \mathcal{D} à une seule saveur. Le conditionnement de l'opérateur $\mathcal{D}(U)$ dépend directement de la masse twistée μ qui apparaît dans l'équation (23). Plus μ est faible plus il est difficile de faire l'inversion pour calculer l'argument de l'exponentielle. L'idée du préconditionnement de Hasenbusch [68] est d'écrire

$$\det \mathcal{D}(\mu) = \det[\mathcal{D}(\mu) \mathcal{D}(\mu_1)] \det[\mathcal{D}^{-1}(\mu_1)]$$

et d'ajuster μ_1 pour optimiser le conditionnement de chaque facteur qui sera calculé avec ses propres pseudofermions. La procédure peut se généraliser à plus de deux facteurs ce qui multiplie le nombre de pseudofermions. Dans la pratique nous en utilisons deux ou trois.

Les pseudofermions ϕ sont des champs avec la même structure que les champs de fermions, mais satisfaisant une statistique bosonique. Ce qui donne dans le cas d'un seul pseudofermion pour simplifier

$$\langle O \rangle = \frac{1}{Z} \int [dU][d\phi d\bar{\phi}] \left[\dots \right]_U e^{-S_g - \bar{\phi}[\mathcal{D}_u(U)^\dagger \mathcal{D}_u(U)]^{-1} \phi}$$

L'évaluation de cette intégrale multidimensionnelle fait appel à des méthodes Monte Carlo comme cela est développé un peu plus loin. On génère donc un échantillon représentatif $\{U\}$, $\{\phi\}$ et $\{\bar{\phi}\}$ avec la densité de probabilité

$$\Pi(U, \phi, \bar{\phi}) = \frac{1}{Z} e^{-S_g - \bar{\phi}[\mathcal{D}_u(U)^\dagger \mathcal{D}_u(U)]^{-1} \phi} \quad (26)$$

Les observables ne dépendent que des variables de liens $\{U\}$, car :

$$\langle O \rangle = \int [dU][d\phi d\bar{\phi}] \left[\dots \right]_U \Pi(U, \phi, \bar{\phi}) \simeq \frac{1}{N} \sum_{\{U\}} \left[\dots \right]_U$$

avec N le nombre de configurations de jauge dans l'échantillon $\{U\}$. On n'a donc pas besoin de stocker les champs de pseudofermions. L'échantillon représentatif est donc constitué de l'ensemble des $\{U\}$ dont chaque élément est appelé *configuration de jauge*.

Si les deux saveurs ne sont pas dégénérées, ce qui sera le cas pour les quarks s et c , alors la formule (25) pour le déterminant n'est pas utilisable. On doit donc calculer le déterminant pour chaque saveur f suivant

$$\det \mathcal{D}_f(U) = \det \sqrt{\mathcal{D}_f^\dagger(U) \mathcal{D}_f(U)} = \int [d\phi d\bar{\phi}] e^{-\bar{\phi}[\mathcal{D}_f(U)^\dagger \mathcal{D}_f(U)]^{-1/2} \phi} \quad (27)$$

Le prix à payer est le calcul d'une matrice à la puissance $-1/2$. Les méthodes les plus courantes sont de remplacer $X^{-1/2}$ par une approximation rationnelle (algorithme Rational HMC [31]) ou par une approximation polynomiale (algorithme Polynomial HMC [53]). Nous avons choisi la deuxième solution qui est développée dans la section 10.5.

10 Algorithmes et méthodes numériques

10.1 Méthodes Monte Carlo

Même dans leur version discrétisée, il est impossible avec la puissance de calcul aujourd'hui (et même dans un proche futur) d'évaluer les intégrales de chemin en intégrant les variables liées à chaque sommet et chaque lien. Pour apprécier cela, prenons l'exemple du groupe de jauge $SU(3)$ et d'un réseau avec $L = 30$ points dans chaque direction ce qui est commun actuellement. Nous avons $4 \times L^4 = 3\,240\,000$ variables de liens appartenant à $SU(3)$. Chaque sommet à 8 liens mais il faut diviser par 2 pour éviter un double comptage, d'où le facteur 4. Chaque matrice de $SU(3)$ peut se décrire à l'aide de 8 paramètres réels. Au final, le nombre de degrés de liberté est donc de l'ordre de plusieurs dizaines de millions.

Ainsi toute tentative de calculer sur réseau en utilisant des méthodes exactes ou des techniques numériques classiques comme la méthode des trapèzes ou celle de Simpson est vouée à l'échec. L'utilisation de ces techniques adaptées au cas à une dimension conduit à une complexité qui croît exponentiellement avec le nombre de dimensions.

Le nombre gigantesque de degrés de liberté suggère de faire appel à des méthodes statistiques pour effectuer les intégrations. Une des méthodes les plus populaires pour évaluer des intégrales multidimensionnelles, et souvent la seule disponible est la méthode de Monte Carlo, dont l'application à QCD est développée dans [34] et [96]. La loi des grands nombres garantira alors que l'erreur statistique commise se comportera, quelle que soit le nombre de dimensions, comme $\frac{1}{\sqrt{N}}$ où N est le nombre de tirage.

Pour donner un premier exemple, supposons que nous voulons évaluer l'intégrale sur le domaine \mathcal{V} ,

$$I = \int_{\mathcal{V}} f(x) dx$$

où le symbole \int peut signifier aussi bien une somme discrète que continue. L'idée de base de l'algorithme de Monte Carlo est

1. Créer un ensemble de N points aléatoires $x^{(i)}$ distribués uniformément dans \mathcal{V}
2. Calculer $\frac{Vol(\mathcal{V})}{N} \sum_{i=1}^N f(x^{(i)})$ où $Vol(\mathcal{V})$ est le volume du domaine \mathcal{V}

Néanmoins en QCD sur réseau nous avons à faire à des intégrales plus spécifiques dans lesquelles une *densité de probabilité ou poids* apparaît. L'exemple typique est

$$I = \int_{\mathcal{V}} f(x) \Pi(x) dx$$

où $\Pi(x)$ est une densité de probabilité

$$\Pi(x) \geq 0 \text{ et } \int_{\mathcal{V}} \Pi(x) dx = 1$$

Dans ce cas de figure, l'algorithme présenté ci-dessus a toutes les chances de ne pas être efficace si la densité $\Pi(x)$ possède des pics pour certaines régions de x . Pour prendre cela en compte, nous devons tirer plus de points là où le poids est important et moins ailleurs. C'est ce que l'on appelle *l'échantillonnage préférentiel (importance sampling)*. Il s'agit d'un cas particulier des techniques de réduction de variance qui essaient d'améliorer la précision des estimateurs obtenus par les méthodes Monte Carlo.

L'algorithme avec *l'échantillonnage préférentiel* devient donc

1. Créer un ensemble de N points aléatoires $x^{(i)}$ distribués dans \mathcal{V} selon la densité $\Pi(x)$
2. Calculer $\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N f(x^{(i)})$

Il reste maintenant à générer un échantillon selon la densité $\Pi(x)$. Hormis de rares cas où cela peut être fait de manière exacte, la méthode communément utilisée est de recourir à un *processus de Markov*. Le principe est de partir d'un ensemble déjà créé, puis de faire une transformation pour en obtenir un nouveau, et ainsi former une chaîne. La transformation ne doit dépendre que de l'état de départ et de celui d'arrivée. On peut de

plus montrer que si la transformation respecte certaines conditions, dont la principale est la *balance détaillée*, alors la chaîne a la propriété de posséder une distribution stationnaire unique. Soit $\Pi_{eq}(\xi_i)$ cette distribution pour un état ξ_i et $P(\xi_i \rightarrow \xi_j)$ la probabilité de transition entre l'état ξ_i et ξ_j alors la balance détaillée se traduit par

$$\Pi_{eq}(\xi_i)P(\xi_i \rightarrow \xi_j) = \Pi_{eq}(\xi_j)P(\xi_j \rightarrow \xi_i) \quad (28)$$

Cette distribution d'équilibre est atteinte après un temps, ou nombre d'itérations, appelé *thermalisation* qui dépend du point de départ de la chaîne. Il existe des méthodes satisfaisant à la condition de balance détaillée et qui garantissent que la distribution d'équilibre sera la distribution que l'on veut échantillonner. Parmi les algorithmes les plus utilisés on a l'algorithme de Metropolis [93, 70], l'algorithme de Langevin [117] et le bain thermique [33]. Ils doivent satisfaire une propriété d'ergodicité afin d'examiner tout l'espace sans avoir de biais en restant confiné dans une région.

Le traitement des erreurs statistiques liées à l'utilisation de chaînes de Markov qui introduisent nécessairement une autocorrélation entre les éléments de la chaîne, peut être réalisé en utilisant les méthodes Jackknife [111] et Bootstrap [43].

10.2 Nombres aléatoires

Les méthodes Monte Carlo ont besoin de nombres aléatoires. Les ordinateurs étant déterministes, on utilise des nombres pseudoaléatoires. Parmi les bons générateurs de nombres pseudoaléatoires on trouve Ranlux [88] avec une période d'environ 10^{171} s'il est correctement initialisé et Mersenne Twister [91] dont la période est un nombre premier de Mersenne. La variante la plus commune a une période de $2^{19937} - 1 \simeq 4 \times 10^{6001}$. Le générateur Ranlux qui est utilisé par le code tmLQCD retourne des nombres uniformément distribués dans l'intervalle $[0; 1[$.

Dans l'algorithme Hybrid Monte Carlo (HMC) nous aurons besoin de nombres aléatoires distribués selon la loi gaussienne d'espérance μ et d'écart type σ , dont la densité de probabilité est :

$$\varphi(x) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}}$$

La méthode de transformation de Box–Muller permet de créer une telle distribution à partir d'un générateur de nombres aléatoires distribués selon une loi uniforme.

Algorithme 1 Transformation de Box–Muller

- 1: Tirer 2 nombres au hasard $U_{1,2} \in]0; 1]$ distribués selon une loi uniforme
 - 2: Calculer $\theta = 2\pi U_1$ et $\rho = \sqrt{-2 \ln U_2}$
 - 3: $\rho \cos \theta$ et $\rho \sin \theta$ sont alors indépendants et distribués selon une loi normale centrée réduite (cas $\mu = 0$ et $\sigma = 1$)
-

La démonstration peut être trouvée dans la référence [81], il s'agit essentiellement d'un changement de coordonnées polaires. Dans le code tmLQCD, les nombres générés le sont selon la densité

$$\varphi(x) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} e^{-x^2}$$

qui correspond au cas $\mu = 0$ et $\sigma = \frac{1}{\sqrt{2}}$.

10.3 Algorithme de Metropolis

Il a été publié pour la première fois dans [93] en 1953 pour évaluer des quantités relatives aux équations d'état des molécules. L'algorithme comporte deux étapes, une étape de proposition de changement, puis un test d'acceptance.

Algorithme 2 Algorithme de Metropolis

- 1: Partant d'un état initial des champs que l'on note de façon globale ξ_i , on effectue une transformation *réversible* pour créer un nouvel état ξ_f .
- 2: On effectue un *test d'acceptance*, c'est-à-dire que l'on accepte le nouvel état dans l'échantillon avec une probabilité

$$\min(1, \frac{\Pi(\xi_f)}{\Pi(\xi_i)}),$$

sinon on garde l'ancien état.

Une réalisation possible de l'algorithme de Metropolis est l'échantillonnage de Gibbs dans lequel les deux étapes sont effectuées sur chaque degré de liberté (c'est-à-dire les valeurs des champs sur les sites ou les liens) successivement. Les échantillonneurs de Gibbs sont efficaces en terme de calcul pour des théories locales mais échouent lorsque tous les degrés de liberté de la théorie interagissent entre eux. De plus le temps de thermalisation est long et les corrélations entre les états de la chaîne sont fortes.

10.4 HMC

Pour palier aux inconvénients des échantillonneurs de Gibbs, il a été proposé en 1987 [42] d'utiliser une dynamique moléculaire comme première étape de l'algorithme de Metropolis. L'état proposé par la dynamique moléculaire est ensuite soumis au test d'acceptance. Au lieu d'utiliser la densité définie par l'équation (26), on va ajouter un nouveau terme $\frac{1}{2}P^2$ pour former la densité

$$\Pi'(U, P, \phi, \bar{\phi}) = \frac{1}{Z'} e^{-S_g - \frac{1}{2}P^2 - \bar{\phi}[\mathcal{D}_u(U)^\dagger \mathcal{D}_u(U)]^{-1}\phi} \quad (29)$$

L'ajout de ce terme ne modifie pas les fonctions de corrélations, en effet

$$\langle O \rangle = \int [dU][d\phi d\bar{\phi}] \left[\dots \right]_U \Pi(U, \phi, \bar{\phi}) = \int [dU][dP][d\phi d\bar{\phi}] \left[\dots \right]_U \Pi'(U, P, \phi, \bar{\phi})$$

On va maintenant considérer les variables de liens comme étant les degrés de liberté d'un système classique et P les moments conjugués de ces variables. Le hamiltonien classique gouvernant la dynamique est donc

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2}P^2 + S_g(U) + \bar{\phi}[\mathcal{D}_u(U)^\dagger \mathcal{D}_u(U)]^{-1}\phi$$

Les équations du mouvement correspondantes

$$\frac{dU}{d\tau} = \frac{\delta \mathcal{H}}{\delta P}, \quad \frac{dP}{d\tau} = -\frac{\delta \mathcal{H}}{\delta U} \quad (30)$$

sont intégrées numériquement par rapport à un temps fictif τ . A la fin de la trajectoire on obtient une configuration de jauge de même énergie mais très différente de celle du début de la trajectoire, ce qui permet d'explorer efficacement l'espace des configurations possibles. Les étapes de l'algorithme sont regroupées dans l'algorithme 3.

Algorithme 3 Algorithme HMC

- 1: On part des variables de liens initiales U_i
- 2: Tirer les moments initiaux P_i avec une distribution gaussienne
- 3: Tirer des champs η avec une distribution gaussienne. Puis calculer $\phi = \mathcal{D}_u(U_i)^\dagger \eta$
- 4: Calculer l'énergie initiale du système $E_i = \frac{1}{2}P_i^2 + S_g(U_i) + \bar{\phi}[\mathcal{D}_u(U_i)^\dagger \mathcal{D}_u(U_i)]^{-1}\phi$
- 5: Intégrer numériquement les équations du mouvement pour U, P définies par le hamiltonien \mathcal{H} . Cette étape nécessite des inversions de l'opérateur de Dirac.
- 6: Calculer l'énergie finale du système $E_f = \frac{1}{2}P_f^2 + S_g(U_f) + \bar{\phi}[\mathcal{D}_u(U_f)^\dagger \mathcal{D}_u(U_f)]^{-1}\phi$ et ainsi la variation d'énergie $\Delta E = E_f - E_i$
- 7: Accepter la nouvelle configuration, c'est-à-dire les variables de liens finales U_f , avec la probabilité

$$P_A = \min(1, e^{-\Delta E})$$

Il est possible de démontrer, en utilisant la réversibilité des équations du mouvement et la conservation du volume d'espace des phases que cet algorithme satisfait la condition de balance détaillée pour la densité d'équilibre

$$\Pi_{eq} = \Pi'(U, P, \phi, \bar{\phi})$$

avec Π' définie par l'équation (29). Il existe une classe d'intégrateurs qui conservent le volume de l'espace des phases et sont réversibles. Ce sont les intégrateurs réversibles *symplectiques* comme celui du *leap-frog* [65] ou de Sexton-Weingarten. Nous utilisons la généralisation 2MN [104, 105] (2nd order minimum norm) de ce dernier dont une étude pour QCD sur réseau se trouve dans la référence [124]. Par contre, la méthode d'Euler standard d'intégration des équations différentielles n'est pas symplectique et ne peut donc être utilisée.

Si l'intégration des équations du mouvement n'est pas exacte ($\Delta E \neq 0$) ou si l'on remplace \mathcal{H} par une approximation, l'algorithme va quand même converger vers la distribution voulue (29) pourvu que le test d'acceptance (étape 7) soit fait avec la valeur de ΔE calculée avec le hamiltonien exact. Pour avoir un taux d'acceptance convenable il faut que ΔE soit de l'ordre de 0.1 alors que E peut être de l'ordre de 10^6 . Ceci implique d'être attentif aux problèmes d'arrondis numériques.

Le calcul de la force $-\delta\mathcal{H}/\delta U$ dans les équations du mouvement (30) nécessite des inversions. Pour améliorer la performance de l'algorithme, de nombreux raffinements existent dont le préconditionnement à la Hasenbusch, les intégrateurs multi-steps (pour le leapfrog [115]), les inverseurs chronologiques [22].

10.5 Polynomial HMC

Comme expliqué au début de cette partie, le cas de deux saveurs de quarks non-dégénérés conduit à utiliser la puissance -1/2 d'un opérateur. Le principe est de rem-

placer la fonction $1/\sqrt{x}$ par une approximation polynomiale P comme présenté dans la référence [53].

Si l'on reprend l'équation (25) on écrit

$$\int [d\phi d\bar{\phi}] e^{-\bar{\phi}[\mathcal{D}_f(U)^\dagger \mathcal{D}_f(U)]^{-1/2} \phi} \simeq \int [d\phi d\bar{\phi}] e^{-\bar{\phi} P(\mathcal{D}_f(U)^\dagger \mathcal{D}_f(U)) \phi} \quad (31)$$

On construit P à partir des polynômes de Tchebychev qui sont les meilleurs approximations pour la norme infinie. Le polynôme P est construit pour approximer, avec une certaine précision, la fonction $1/\sqrt{x}$ sur un intervalle incluant le spectre de l'opérateur. Pour évaluer une somme de polynômes de Tchebychev on utilise l'algorithme récursif de Clenshaw qui est robuste vis-à-vis des erreurs d'arrondi [24].

Comme dans le cas de l'algorithme HMC où le hamiltonien de la dynamique moléculaire n'est pas nécessairement le même que celui du test d'acceptance, on peut utiliser différents polynômes. Nous tirons parti de cette possibilité pour utiliser un polynôme de degré modeste (environ 100) dans le hamiltonien de la dynamique moléculaire et un polynôme précis (de degré environ 1800) pour le test d'acceptance. Le polynôme pour la dynamique moléculaire est évalué de nombreuses fois durant une trajectoire, et il est donc avantageux de limiter son degré. Des détails sur le choix des paramètres et la création proprement dite des polynômes sont donnés dans la sous-section 14.1.

10.6 Résolution de systèmes linéaires

En pratique, on est très souvent amené à résoudre des systèmes linéaires avec l'opérateur de Dirac. Notamment pour le calcul des propagateurs, mais aussi pour le calcul des forces lors de la création des configurations de jauge. Le calcul des propagateurs sur une configuration donnée peut représenter un temps non négligeable. En outre, il existe plusieurs types de propagateurs suivant le type de source utilisée (voir section 18).

La forme générale du système à résoudre est, pour la saveur A

$$\mathcal{D}_{A,\alpha\beta}^{ab}(x,y) S_{A,\beta\gamma}^{bc}(y,z) = \Sigma_{A,\alpha\gamma}^{ac}(x,z)$$

où a,b,c sont les indices de couleur, α,β,γ sont les indices de Dirac et on utilise la convention de sommation sur les indices répétés y compris la position x,y,z .

Σ est appelé la *source* et pour une source locale on a

$$\Sigma_{A,\alpha\gamma}^{ac}(x,z) = \delta^{ac} \delta_{\alpha\gamma} \delta(x,z)$$

Comme déjà évoqué précédemment l'opérateur D est une matrice de très grande dimension mais creuse car ne couplant que les plus proches voisins. Pour résoudre le système linéaire l'algorithme du pivot de Gauss est dans ce cas inefficace et on utilise plutôt des méthodes itératives de minimisation comme le gradient conjugué. Le gradient conjugué, qui est la méthode que nous utilisons, fait parti de la classe des méthodes utilisant les espaces de Krylov. D'autres méthodes utilisant les espaces de Krylov sont le gradient biconjugué stabilisé ou l'algorithme GMRES (Generalized Minimal Residual Method). Enfin il existe d'autres algorithmes comme la déflation inexacte [89] de Lüscher qui vise à enlever les petits modes propres de l'opérateur de Dirac pour accélérer le calcul.

L'algorithme du gradient conjugué permet de résoudre $Ax = b$ où A est une matrice hermitienne définie positive comme $M^\dagger M$ par exemple. L'idée est de minimiser la fonction

$$f : x \mapsto \frac{1}{2}(Ax, x) - (b, x)$$

qui a pour gradient $\nabla f(x) = Ax - b$. Le symbole $(,)$ représente le produit scalaire. La solution x_{k+1} à l'étape $k+1$ est reliée à celle de l'étape précédente par $x_{k+1} = x_k + \alpha_k p_k$. Le coefficient α_k est déterminé en minimisant la fonction f , et la direction p_k est choisie "A-conjugée" aux précédentes, c'est-à-dire

$$(p_i, Ap_k) = 0 \text{ pour } i < k$$

L'algorithme 4 récapitule l'ensemble des étapes. Le nombre maximum d'itérations est

Algorithme 4 Gradient conjugué

- 1: Choisir un vecteur x_0 pour démarrer. Si l'on a une idée approximative de la solution alors on peut l'utiliser, sinon $x_0 = 0$ convient.
 - 2: $r_0 = b - Ax_0$
 - 3: $p_0 = r_0$
 - 4: $k = 0$
 - 5: **Tant que** $k < k_{max}$ **faire**
 - 6: $\alpha_k = \frac{(r_k, r_k)}{(p_k, Ap_k)}$
 - 7: $x_{k+1} = x_k + \alpha_k p_k$
 - 8: $r_{k+1} = r_k - \alpha_k Ap_k$
 - 9: **Si** $(r_{k+1}, r_{k+1}) < \epsilon^2(r_0, r_0)$ **alors**
 - 10: On sort de la boucle
 - 11: **fin Si**
 - 12: $\beta_k = \frac{(r_{k+1}, r_{k+1})}{(r_k, r_k)}$
 - 13: $p_{k+1} = r_{k+1} + \beta_k p_k$
 - 14: $k = k + 1$
 - 15: **fin Tant que**
 - 16: **Retourner** x_{k+1}
-

fixé par k_{max} et la précision relative voulue par ϵ . On peut aussi imposer une précision absolue au lieu d'une précision relative. Il peut être prudent de recalculer le résidu à la fin car des erreurs d'arrondi peuvent s'accumuler au fil des itérations. Une façon d'accélérer l'inversion est de préconditionner la matrice. Par exemple, le préconditionnement pair/impair utilise une décomposition de la matrice en blocs selon la parité de chaque site, c'est-à-dire selon la parité de $t + x + y + z$.

11 Code tmLQCD

Certaines informations de cette section peuvent être amenées à changer notamment au niveau des codes informatiques et des configurations des machines.

11.1 Description

Le code tmLQCD est celui que nous avons utilisé au sein de la collaboration ETM pour produire les configurations de jauge et faire les inversions nécessaires pour obtenir les propagateurs de quarks. Il a fait récemment l'objet d'un article [76]. C'est un code écrit en langage C, utilisable sur divers processeurs (Pentium, Xeon, Itanium, Athlon, PowerPC, Alpha, ...), divers systèmes d'exploitation (Linux, AIX, True64, ...) et divers compilateurs (gcc, icc, xlc, pgcc, ...). Il possède des optimisations spécifiques à certaines architectures comme l'utilisation des instructions SSE et de fonctions intrinsèques pour tirer le meilleur parti de la double unité arithmétique sur BlueGene.

La librairie lime [25] (Lattice QCD Interchange Message Encapsulation) développé par le SciDAC [114] (Scientific Discovery through Advanced Computing Program) est nécessaire pour le fonctionnement du code. Cette librairie permet d'encapsuler dans un fichier divers enregistrements pouvant être de type ASCII ou binaire. Cette librairie est utilisée par l'organisation internationale ILDG [71] (International Lattice Data Grid) qui a défini un format commun permettant l'échange des configurations de jauge à travers un système de grille. Les bibliothèques d'algèbre linéaire Blas, Lapack, Arpack et Parpack peuvent éventuellement être nécessaires suivant les programmes.

Le code fournit plusieurs exécutables dont les principaux sont :

1. hmc_tm : création des configurations de jauge pour $N_f = 2$
2. phmc_tm : création des configurations de jauge pour $N_f = 2 + 1 + 1$
3. invert : calcul des propagateurs (secteur léger : quarks u,d)
4. invert_doublet : calcul des propagateurs (secteur lourd : quarks s,c)
5. benchmark : programme qui fournit la performance du code de l'opérateur de Dirac

Ces exécutables ont une version monoprocesseur et une version parallèle. La version parallèle utilise la librairie MPI (Message Passing Interface) pour effectuer la parallélisation. On peut choisir un découpage selon 1, 2, 3 ou 4 dimensions. Le réseau est découpé en sous-réseaux avec un halo qui sert pour les échanges entre plus proches voisins. On choisit lors de la configuration du code, avant la compilation, les dimensions selon lesquelles la parallélisation s'effectue. L'activation du parallélisme se fait avec **--enable-mpi** et le choix du nombre de dimensions avec **--with-mpidimension**. Ainsi :

1. 1 dimension implique un découpage selon la direction t
2. 2 dimensions impliquent un découpage selon les directions t et x
3. 3 dimensions impliquent un découpage selon les directions t, x et y
4. 4 dimensions impliquent un découpage selon les directions t, x, y et z

Il faut noter que l'utilisation du parallélisme rend la reproductibilité de la production des configurations de jauge plus difficile, mais que cela est quand même possible. Le code peut effectuer des mesures au vol de quelques quantités (corrélateur pseudoscalaire-pseudoscalaire, axial-pseudoscalaire, ...). La fréquence de ces mesures est réglable dans le fichier des paramètres. Quelques exemples de fichiers de paramètres se trouvent en appendice 30.

Pour les processeurs Xeon multi-coeurs comme sur la machine Jade du CINES, il est important de penser à désactiver toutes les optimisations SSE, puis de compiler avec

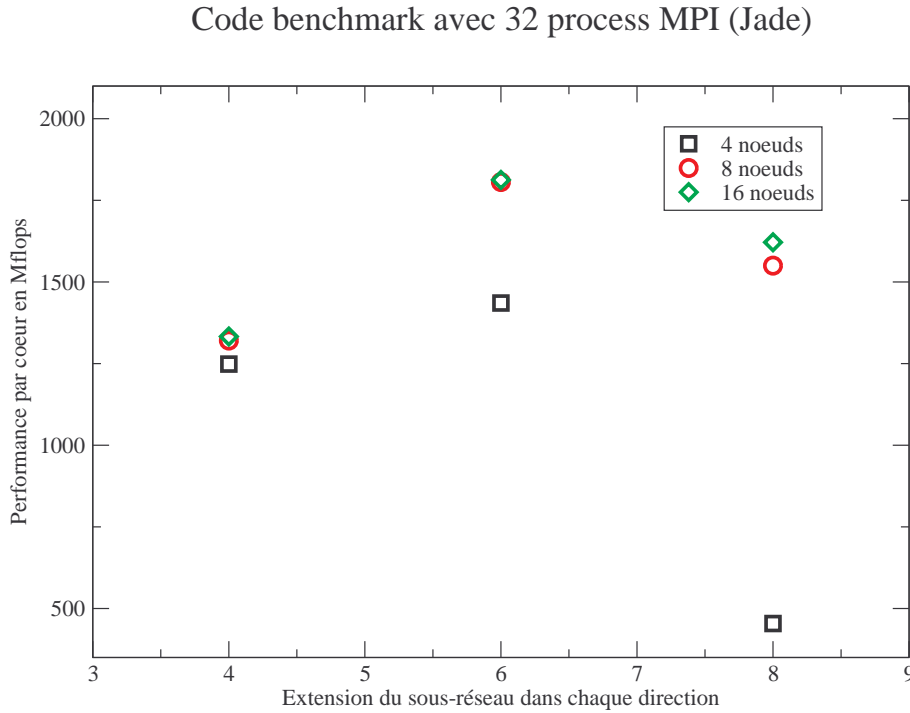


FIG. 14 – Exemple de performance obtenue sur Jade (CINES) sans les optimisations SSE et avec l'utilisation du compilateur Intel icc.

le compilateur Intel icc et d'utiliser de petits volumes locaux. Pour donner une idée de l'amélioration on a, en moyenne, avec gcc et les optimisations SSE activées sur Jade une performance par coeur de seulement 170 Mflops environ, c'est-à-dire 1.4 % de la puissance théorique ! La figure 14 montre la variabilité des performances que l'on peut obtenir, mais on observe dans tous les cas que l'on a des valeurs bien supérieures à 170 Mflops par coeur.

Dans le code tmLQCD, l'application des conditions aux limites anti-périodiques dans la direction temporelle pour les fermions se fait via une phase répartie sur chaque tranche de temps. Le facteur $-1 = \left[e^{i\pi/T} \right]^T$ où T est le nombre de tranches temporelles, est distribué de telle sorte que la tranche t a une phase $e^{i\pi t/T}$. Il est important de tenir compte de cette phase lors de l'analyse des corrélateurs.

11.2 Erreurs courantes

La liste non exhaustive ci-dessous recense les erreurs courantes rencontrées lors de la compilation et de l'édition des liens du code tmLQCD et d'autres :

1. Une des erreurs les plus fréquentes arrive lors de l'édition des liens (undefined reference to toto). C'est le signe que l'éditeur de liens n'arrive pas à trouver la fonction toto dans les bibliothèques. La commande nm qui permet de lister les symboles dans les fichiers objets, peut être utile pour trouver dans quelle bibliothèque la fonction

toto est définie. Si la fonction toto est définie dans la librairie que l'on examine avec nm alors la lettre T apparaîtra devant le nom toto. Si la lettre U apparaît alors c'est que la fonction n'est pas définie dans cette librairie.

2. Problème d'incompatibilité entre 32 et 64 bits. Si l'on compile les fichiers sources en activant le mode 64 bits, alors il faut faire l'édition des liens en utilisant aussi des librairies 64 bits.
3. Sur BlueGene, on ne se connecte jamais directement sur les noeuds de calcul mais sur une frontale. Or les processeurs et le système d'exploitation de la frontale et des noeuds de calcul sont différents. Il faut donc "cross-compiler" lorsque l'on veut avoir un exécutable pour les noeuds de calcul. Ceci est aussi à faire pour les librairies notamment lime.
4. Les erreurs de segmentation sont souvent dues à des tentatives d'accès au-delà des limites des tableaux alloués en mémoire. Un débogueur comme gdb ou le module Memcheck de Valgrind sont très efficaces pour les corriger.
5. Sur certains systèmes notamment ceux utilisant AIX, la commande make n'est pas la version GNU de make. Il faut dans ce cas se servir de gmake.
6. Si l'on alloue statiquement de très gros tableaux (plus de 2Go) alors il peut être nécessaire d'utiliser ulimit pour modifier la taille de la pile (stack) et de compiler avec un modèle mémoire adéquat (-mmodel=medium par exemple)
7. Lorsque l'on compile la version parallèle du code, il est bien plus facile d'utiliser les compilateurs adaptés à MPI (wrappers) comme mpicc. L'option -show permet généralement de connaître le compilateur invoqué par le wrapper ainsi que les librairies associées.
8. Si l'on utilise l'assembleur inline de gcc pour tirer parti des instructions SSE alors il faut faire attention à l'alignement en mémoire des variables (utiliser le mot-clé `__attribute__` et l'attribut `aligned` avec gcc par exemple). Si les variables sont mal alignées des erreurs de segmentation peuvent apparaître.
9. Le comportement du compilateur xlc vis-à-vis du flag -M diffère de celui de gcc, ce qui peut poser problème lors de l'étape de création des dépendances des Makefiles.

12 Les machines

12.1 L'utilisation du parallélisme

Depuis le début des années 1980 lorsque les premières simulations numériques en QCD sur réseau ont eu lieu, diverses machines dédiées aux calculs sur réseau ont été construites. Parmi elles la série des machines APE (APE100, APEmille, apeNEXT) construites par l'INFN rejoint par le centre de recherche DESY puis l'université Paris-Sud 11. Mais aussi les machines QCDSF puis QCDOC construites par l'université d'Edimbourg, l'université de Columbia, le centre de recherche RIKEN Brookhaven et IBM et enfin le projet PACS-CS à l'université de Tsukuba. Ce sont des machines parallèles car les calculs sur réseau se prêtent naturellement à une décomposition en sous-domaines.

Le réseau hypercubique à 4 dimensions (4D) est divisé en sous-réseaux hypercubiques 4D plus petits et chacun est alors traité séparément par un processeur (ou plus

exactement par un coeur de calcul). Il existe une distinction entre parallélisme SPMD (Single Program Multiple Data) et parallélisme MPMD (Multiple Program Multiple Data) utilisé par exemple pour coupler des codes. Les codes en QCD sur réseau sont très majoritairement de type SPMD, car on applique le même programme mais à des données différentes qui sont les différentes parties du réseau. Les calculs sont homogènes, c'est-à-dire que l'on réalise des opérations identiques sur tous les points du réseau.

Les échanges de données sont essentiellement entre plus proches voisins, sauf en ce qui concerne les opérations de réduction (somme globale, recherche du minimum ou du maximum sur tout le réseau, ...). En conséquence si le découpage est régulier, chaque coeur de calcul a le même volume de données à traiter et il n'y a pas de problème d'équilibrage de charge.

La fréquence élevée des échanges entre plus proches voisins nécessite un très bon réseau de communication surtout au niveau de la latence. Les calculs sur réseau en QCD sont donc très exigeants à ce niveau et ne sont pas des problèmes dits à "parallélisme embarrassant" (ou gros grain) pour lesquels il y a peu de communication entre les processus. Dans ce dernier cas, des architectures de type grille de calcul distribuée ou cluster sont suffisantes. Notons qu'une partie des calculs sur réseau, le calcul des propagateurs pour une configuration de jauge donnée, peut se faire sur ce type d'installation (grille, cluster) si les capacités de chaque noeud, notamment en mémoire, sont suffisantes. Cela suppose évidemment que les configurations de jauge soient facilement accessibles depuis chaque noeud. La scalabilité et l'efficacité sont alors optimales puisque aucun échange n'est nécessaire une fois la configuration transférée.

Si les échanges entre noeuds voisins doivent être performants il en est de même pour les communications entre le coeur de calcul et sa mémoire (pas seulement le cache). En effet dans une approche naïve, l'application de l'opérateur de Dirac avec préconditionnement pair/impair sur un site du réseau demande au moins 1320 opérations flottantes par site. Dans le même temps on doit charger en mémoire 1440 octets si l'on travaille en simple précision ou 2880 en double précision. La bande passante mémoire doit être importante car on effectue moins de une opération par octet chargé. Une stratégie pour augmenter le rapport calcul sur chargement mémoire est de recalculer au vol certains éléments des matrices $SU(3)$ des variables de liens. Cela peut être payant sur des architectures comme les cartes graphiques pour lesquelles la bande passante mémoire est faible par rapport à la puissance de calcul.

Pour la production des configurations de jauge ou l'inversion sur de grands réseaux l'accès à des supercalculateurs est indispensable. Pour améliorer l'efficacité et optimiser la charge de chaque coeur, il est possible de faire du recouvrement calcul/communication. Le code tmLQCD peut tirer parti de ce type de programmation. Le principe est le suivant :

- (i) On lance les transferts entre halos des noeuds voisins
- (ii) Simultanément, on calcule dans le domaine intérieur de chaque noeud qui n'a pas besoin des données du halo
- (iii) Une fois le calcul intérieur fini, on teste si les transferts sont finis
- (iv) Si oui, alors on évalue les frontières. Sinon on attend jusqu'à la fin des transferts en testant périodiquement leur avancement.

12.2 L'architecture BlueGene

12.2.1 Introduction

Le projet BlueGene est une famille de supercalculateurs produits par IBM. Un des buts de ces machines était notamment d'étudier le repliement des protéines, et aussi d'explorer la voie du calcul haute performance sur des architectures massivement parallèles. Le choix de l'architecture fut largement inspiré des ordinateurs QCDSP et QCDOC qui avaient été construits pour les simulations de QCD sur réseau.

La première série fut l'architecture BlueGene/L dont un exemplaire dépassa en septembre 2004, avec 36.01 téraflops, le supercalculateur japonais Earth Simulator, devenant ainsi la machine la plus puissante du monde. Cette machine située au Lawrence Livermore National Laboratory est restée première du top500 de novembre 2004 à juin 2008 avant de se faire dépasser par la machine hybride Roadrunner de IBM. La prochaine génération sera la BlueGene/Q qui vise 20 pétaflops pic en 2011.

La série BlueGene/P est une évolution de la BlueGene/L. Avec notamment une augmentation de la fréquence des processeurs, un passage de deux à quatre coeurs par noeud, une augmentation de la mémoire, une amélioration du réseau de communication. La machine est constituée de racks qui contiennent 1024 noeuds soit 4096 coeurs de calcul chacun. L'élément de base est plutôt le demi-rack (ou midplane) qui contient 512 noeuds. C'est la plus petite configuration avec laquelle on peut avoir la topologie d'un tore 3D sous la forme de 8x8x8 noeuds. Il existe sur BlueGene/P plusieurs modes d'exécution : SMP, DUAL, VN, pour permettre l'exécution de code hybride OpenMP/MPI. Nous avons toujours utilisé le mode VN qui offre le plus de coeurs de calcul avec une limitation mémoire de 512 Mo par coeur ce qui est suffisant pour nous, chaque coeur ne traitant qu'un sous-réseau relativement modeste. Le manuel détaillé de la BlueGene/P est le Redbook d'IBM [27].

Les principales caractéristiques de la BlueGene/P sont

1. Un très bon rapport flops par watt dû au choix d'une faible fréquence processeur.
2. Un bon équilibre entre la bande passante mémoire et la vitesse de calcul.
3. Une machine compacte car coeur de calcul et mémoire sont implantés sur une même carte.
4. Un réseau de communication performant en terme de latence et de débit.
5. Une optimisation des communications grâce à l'existence de plusieurs types de réseaux. Un en forme de tore pour les communications entre plus proches voisins, un en forme d'arbre pour les communications globales et un dédié pour les entrées/sorties.
6. Une fiabilité accrue comparée aux clusters de PC.

Cela fait de la BlueGene une machine de choix pour les calculs en QCD sur réseau.

Lorsqu'un job passe en exécution, la machine alloue un ensemble de noeuds de calcul appelé *partition*. Cette partition est initialisée (boot) lors du premier appel à mpirun ce qui prend de 30 secondes à 2 minutes environ suivant la taille de la partition. Si l'on désire enchaîner plusieurs mpirun dans le même job pour faire plusieurs inversions par exemple alors l'option -nofree de mpirun est utile car elle permet d'éviter que la partition soit arrêtée à la fin du mpirun, pour être réinitialisée lors du mpirun suivant. Le système

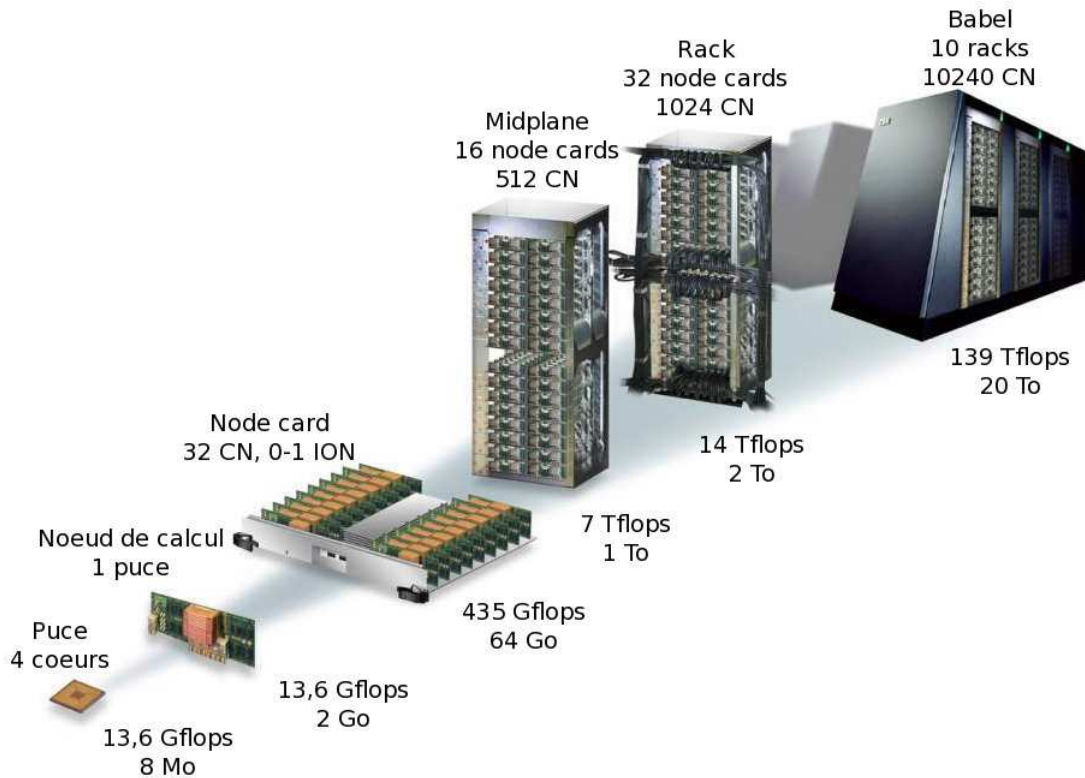


FIG. 15 – Figure éclatée de la machine BG/P de l’IDRIS.

de batch de la machine est l’ordonnanceur LoadLeveler. Un exemple d’en-tête de job pour BlueGene se trouve en annexe 31.

La puissance théorique par coeur du processeur PPC450 qui équipe la BlueGene/P est de 3.4 GFlops car on a au maximum 4 opérations flottantes par cycle et une fréquence de 850 MHz. La puissance soutenue par coeur atteinte par le programme benchmark du code tmLQCD est d’environ 540 MFlops soit environ 16 % du pic. C’est une très bonne performance.

12.2.2 Placement des processus

Le placement (mapping) correct des processus MPI est crucial pour obtenir les meilleures performances. A l’intérieur du code tmLQCD on crée à partir du communicateur initial MPI_COMM_WORLD, une grille cartésienne à 1,2,3 ou 4 dimensions. En pratique sur BlueGene on utilise toujours 4 dimensions vu le nombre de processeurs. L’option -mapfile de mpirun permet de spécifier très précisément l’endroit où chaque processus doit se trouver en machine. Pour nos calculs qui n’ont ni sites, ni directions privilégiés, il n’est pas utile de préciser cette option car la machine va s’arranger pour effectuer le meilleur placement lors de la création de la grille cartésienne.

Toutefois pour que la machine réalise un placement correct il faut que la forme de cette grille soit similaire (à des rotations près) à celle de la partition que la machine va allouer pour notre calcul. Sinon le risque est de voir des processeurs qui sont voisins dans la grille cartésienne, donc qui doivent communiquer entre eux, se retrouver physiquement en machine éloignés les uns des autres. Dans ce cas les communications doivent passer

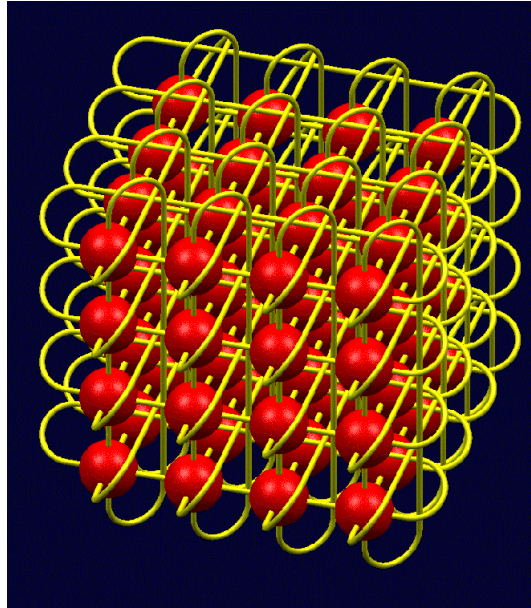


FIG. 16 – Représentation de l'interconnexion torique.

par plusieurs liens dans la machine, ce qui provoque une saturation du réseau très pénalisante.

La forme de la grille cartésienne est spécifiée dans le fichier de paramètres du code avec `NrXProcs`, `NrYProcs` et `NrZProcs`, puis le code déduit le nombre de processeurs selon la direction `t`. En ce qui concerne la topologie de la partition, on ne peut pas à l'IDRIS se servir de la directive `LoadLeveler "bg_shape"` ce qui empêche le choix de la forme. Le seul choix est le nombre de noeuds de calcul qui peut avoir les valeurs 64, 128, 256, 512, 1024, 2048, 4096, 6144, 8192 ou 10240.

Mais lorsque la partition est allouée, on peut accéder à sa forme via la variable `LoadLeveler LOADL_BG_SHAPE`. Elle décrit la topologie en terme de demi-rack, c'est-à-dire que `LOADL_BG_SHAPE = 1x2x1` signifie que l'on a 1 demi-rack selon la direction X de la machine, 2 demi-rack selon la direction Y de la machine et 1 demi-rack selon la direction Z de la machine.

Voici un exemple partiel de fichier de sortie du code benchmark où le placement a pu être effectué correctement sur 4 racks

```

LOADL_BG_SHAPE = 2x2x2
Wed Jun 4 15 :21 :14 CEST 2008
Creating the following cartesian grid for a 4 dimensional parallelisation :
16 x 16 x 16 x 4
(...)
Process 3683 of 16384 on Rank 3683 of 16384 <14,6,3,0> R10-M1-N13-J18 : cart_id 3512, coordinates
(3 6 14 0)
Process 3667 of 16384 on Rank 3667 of 16384 <14,5,3,0> R10-M1-N13-J17 : cart_id 3448, coordinates
(3 5 14 0)

(...)

(535 Mflops [64 bit arithmetic]) (Performance soutenue par coeur avec communications)

communication switched off
(642 Mflops [64 bit arithmetic]) (Performance soutenue par coeur sans communication)

The size of the package is 82944 Byte
The bandwidth is 590.22 + 590.22 MB/sec

```

Le placement d'un processus en machine est donné par le quadruplet entre chevrons avec l'ordre $\langle X, Y, Z, T \rangle$. T est la direction de la machine qui correspond au nombre de coeurs dans un noeud. Les coordonnées de ce même processus dans la grille cartésienne sont fournies par le quadruplet entre parenthèses avec l'ordre (t x y z). Pour vérifier que le mapping est correct il suffit donc de tester si les processeurs voisins dans la grille cartésienne sont voisins en machine. C'est le cas dans l'exemple ci-dessus pour les processus 3683 et 3667 qui sont voisins dans la grille cartésienne selon la direction x, et voisins en machine selon la direction Y.

Et voilà un exemple partiel de fichier de sortie du code benchmark où le placement n'a pas pu être effectué correctement sur 4 racks par la machine à cause des valeurs NrXProcs, NrYProcs et NrZProcs choisies.

```

LOADL_BG_SHAPE = 2x2x2
Wed Jun 4 11 :17 :45 CEST 2008
Creating the following cartesian grid for a 4 dimensional parallelisation :
32 x 16 x 8 x 4
(...)
Process 9372 of 16384 on Rank 9372 of 16384 <12,9,4,2> R31-M0-N06-J22 : cart_id 9372, coordinates
(18 4 7 0)
Process 9884 of 16384 on Rank 9884 of 16384 <12,9,6,2> R31-M0-N07-J22 : cart_id 9884, coordinates
(19 4 7 0)

(...)

(423 Mflops [64 bit arithmetic]) (Performance soutenue par coeur avec communications)

communication switched off
(644 Mflops [64 bit arithmetic]) (Performance soutenue par coeur sans communication)

The size of the package is 72576 Byte
The bandwidth is 200.20 + 200.20 MB/sec

```

On note une chute importante au niveau de la bande passante des communications entre les noeuds, et la répercussion sur la performance avec communications qui passe de 535 à 423 Mflops. Les processus 9372 et 9884 qui sont voisins dans la direction t ne le

sont plus en machine selon la direction Z, ce qui explique la mauvaise performance. Cet effet peut même être plus catastrophique.

Rien n'indiquant que pour un nombre de noeuds donné la machine allouera toujours une partition de forme identique, il est conseillé de mettre un test au début du job pour modifier éventuellement les valeurs de NrXProcs, NrYProcs et NrZProcs.

12.2.3 Scalabilité

La scalabilité ou l'extensibilité d'un code est sa capacité à s'exécuter efficacement avec un nombre croissant de processus. Elle dépend de la nature intrinsèque du problème que l'on étudie, de la façon dont le code est structuré et de la machine que l'on utilise. Il y a deux concepts courants dans le domaine du calcul haute performance à propos de la scalabilité.

Le premier est le *strong scaling* qui consiste à mesurer le temps mis pour résoudre un problème de taille fixe lorsque l'on augmente le nombre de processeurs. Le deuxième est le *weak scaling* qui consiste à garder fixe la taille du problème sur chaque processeur et à mesurer le temps en fonction du nombre de processeurs.

A partir du temps de calcul $T(n)$ pour n processeurs et d'un temps de référence T_{ref} obtenu pour n_{ref} processeurs on peut définir l'accélération $A(n)$ et l'efficacité $E(n)$ pour un test de type strong scaling par

$$\begin{aligned} A(n) &= \frac{T_{ref}}{T(n)} \\ E(n) &= A(n) \frac{n_{ref}}{n} \end{aligned}$$

et pour un test de type weak scaling par

$$\begin{aligned} A(n) &= \frac{n}{n_{ref}} \frac{T_{ref}}{T(n)} \\ E(n) &= \frac{T_{ref}}{T(n)} \end{aligned}$$

Dans tous les cas l'idéal est d'avoir une efficacité de l'ordre de un. Au lieu de mesurer le temps on peut choisir d'évaluer la puissance soutenue totale, c'est-à-dire le nombre d'opérations flottantes par secondes.

Si le strong scaling d'un code est linéaire alors à chaque fois que l'on multiplie le nombre de processeur par 2, le temps de calcul est divisé par 2 ou de manière équivalente la puissance est multiplié par 2. Il arrive que la puissance soit multipliée par plus que 2 si des effets au niveau des caches mémoires entrent en jeu. Pour la QCD sur réseau le strong scaling est typiquement contrôlé par le rapport entre quantité de calcul qu'un processeur doit faire et volume de données à transmettre. Ce rapport, qui est optimal pour un hypercube régulier, finit par diminuer avec l'ajout de processeurs. La figure 17 illustre le strong scaling pour l'application hmc_tm du code tmLQCD. Les figures 18 et 19 montrent l'accélération et l'efficacité pour le programme de benchmark toujours lors d'un test de strong scaling.

Les calculs en QCD sur réseau sont plutôt du type weak scaling. En effet on cherche à la fois à diminuer la maille du réseau pour limiter les effets de discrétisation et à garder

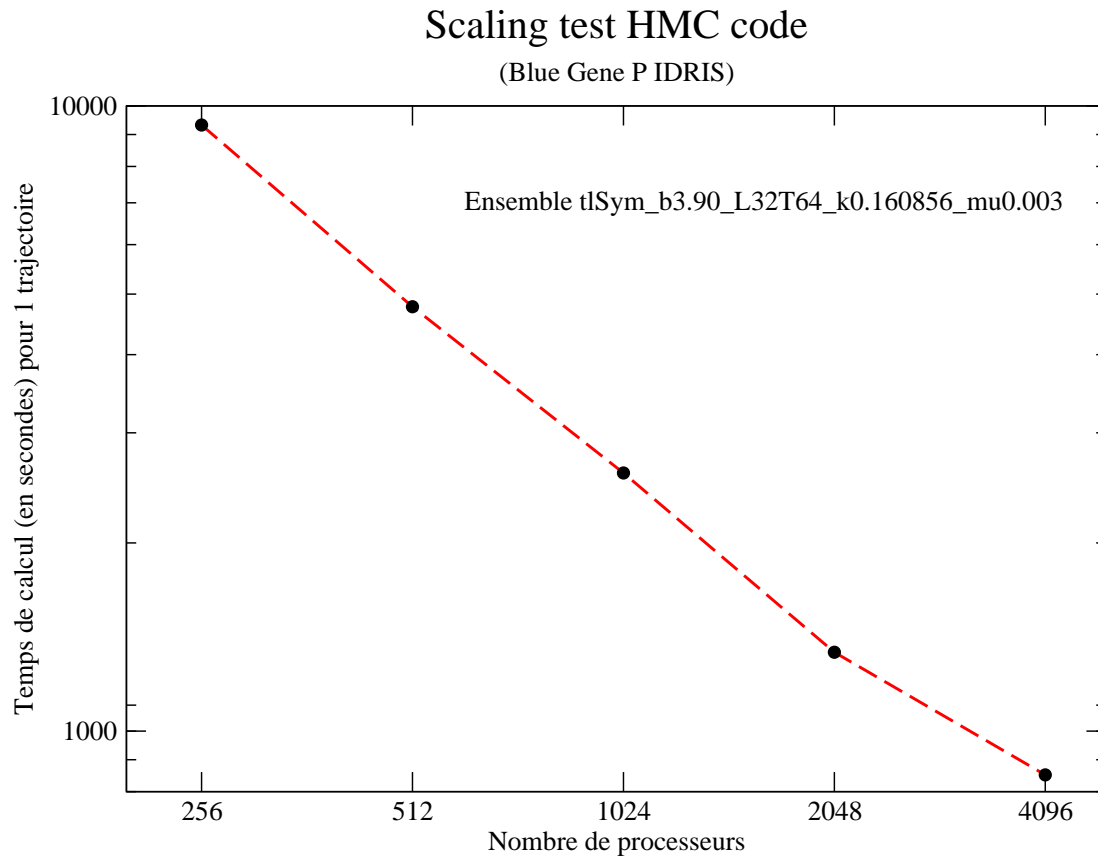


FIG. 17 – Strong scaling obtenu avec le programme `hmc_tm`.

un volume physique suffisant pour éviter des corrections de volume fini. Cela se traduit par l'augmentation du nombre total de points du réseau. Si l'on dispose de plus en plus de processeurs on peut donc conserver un volume constant pour chacun. Les réseaux en tore et en arbre de la BlueGene permettent une accélération linéaire pour les calculs sur réseau jusqu'au nombre maximum de processeurs de la machine sans aucun problème.

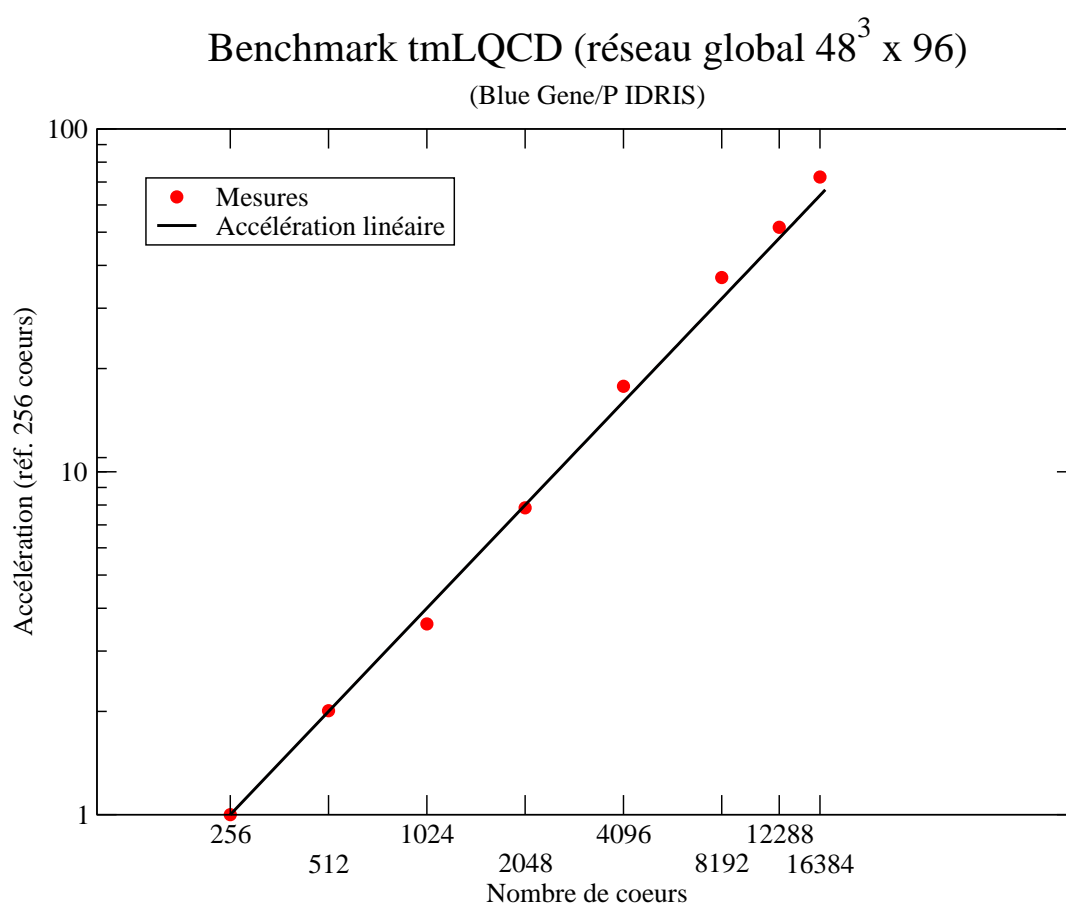


FIG. 18 – Accélération (speed-up) obtenue avec le programme benchmark.

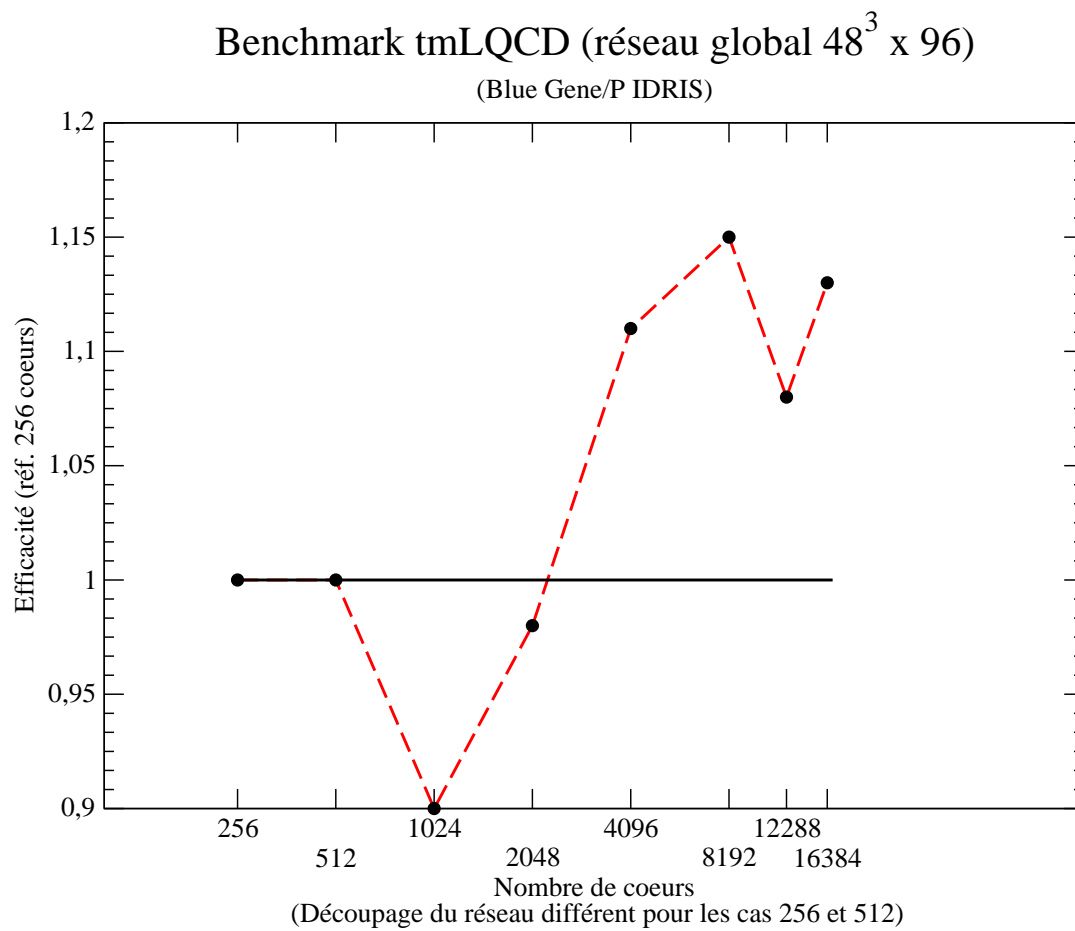


FIG. 19 – Efficacité obtenue avec le programme benchmark.

Sixième partie

Production des configurations de jauge

Sommaire

13	$N_f = 2$	66
13.1	Réglage des paramètres de HMC	68
13.2	Ajustement de κ	70
13.3	Contrôle de la simulation $N_f = 2$	71
14	$N_f = 2 + 1 + 1$	72
14.1	Réglage des paramètres de PHMC	73
14.2	Création du polynôme	75
14.3	Ajustement de κ	76
14.4	Contrôle de la simulation	77
14.5	Secteur léger	79
14.6	Secteur lourd	82

La production des configurations de jauge est la première étape en QCD sur réseau. Elle sera suivie par le calcul des propagateurs, puis le calcul des contractions et enfin l'analyse des corrélateurs. Ces diverses étapes vont approximativement de la plus coûteuse en temps calcul à la moins coûteuse. La production des configurations doit obligatoirement se faire sur des supercalculateurs. Le calcul de tous les propagateurs qui produit des dizaines de téraoctets de données est toutefois non négligeable et doit se faire sur de grosses machines pour les réseaux les plus grands.

Au moment où cette thèse a commencé fin 2006, les moyens de calcul disponibles en France n'étaient pas suffisants pour produire les configurations de jauge $N_f = 2$. Les deux machines ApeNEXT françaises sont arrivées assez tard et leur puissance était de toute façon trop modeste pour une production massive. C'est ce qui explique pourquoi la majorité des configurations $N_f = 2$ ont été produites par la partie allemande de la collaboration ETM. La mise en service mi-2008 de la machine BlueGene/P à l'IDRIS a changé la donne et a permis à la composante française de devenir l'acteur principal de la production des configurations de jauge. Un effort particulier a été consacré à la simulation $N_f = 2 + 1 + 1$ c'est-à-dire quatre quarks dynamiques u, d, s et c comme expliqué dans la sous-section 8.2. Nous avons aussi produit des configurations $N_f = 2$ pour une nouvelle valeur de $\beta = 4.2$ correspondant à $a \simeq 0.056$ fm afin d'améliorer la limite du continu comme expliqué dans la section suivante.

Pour donner un ordre de grandeur, 50 000 000 d'heures processeurs ont été consommées sur la BlueGene/P en 2008. En 2009, la consommation sera probablement d'environ 120 000 000 d'heures. Le tableau 1 donne le détail du temps de calcul en fonction des paramètres pour les calculs effectués à l'IDRIS, ce qui constitue l'essentiel des résultats collectés dans les sous-sections 14.5 et 14.6. Remarquons que la grande différence entre les valeurs de β entre $N_f = 2$ et $N_f = 2 + 1 + 1$ s'explique par le changement de l'action de jauge utilisée.

Bien que la gestion pratique de la simulation $N_f = 2 + 1 + 1$ a été une part importante de cette thèse, l'extraction des observables physiques en est encore à un stade préliminaire. C'est pourquoi l'essentiel des résultats que nous montrons dans la suite ont été obtenus avec les configurations $N_f = 2$.

13 $N_f = 2$

Lors des simulations avec deux saveurs de quarks dégénérés, des configurations de jauge pour trois valeurs différentes de β donc pour trois mailles différentes avaient été produites dans un premier temps. Néanmoins les instabilités apparues à $\beta = 3.8$ ne permettaient pas une détermination précise du κ critique. Ainsi les simulations réalisées pour cette valeur n'ont servi que pour tester la cohérence des données extraites pour les deux autres valeurs $\beta = 3.9, \beta = 4.05$, et n'ont généralement pas été utilisées pour faire l'extrapolation vers la limite du continu.

L'utilisation de seulement deux pas de réseau différents ne permettant pas de contrôler finement cette extrapolation, il a été décidé de produire des configurations de jauge pour une nouvelle valeur de la maille correspondant à $\beta = 4.2$, c'est-à-dire $a \simeq 0.056$ fm. Si l'on veut atteindre des masses de pion aux alentours de 300 MeV tout en limitant les effets de volume fini en imposant $m_\pi L \geq 3.5$, alors il faut utiliser des réseaux avec $L=48$

Nom	L	T	$a\mu$	κ	Temps moyen/trajectoire (en s)	Racks	Trajectoires thermalisées
$N_f = 2, \beta = 4.20$							
	24	48	0.002	0.154073	$\simeq 216$	0.5	$\simeq 5700$
	32	64	0.0065	0.154073	$\simeq 323$	1	$\simeq 5700$
	48	96	0.002	0.154079	$\simeq 1617$	2	$\simeq 2000$
	48	96	0.002	0.154073	$\simeq 1503$	2	$\simeq 4700$
$N_f = 2 + 1 + 1, \beta = 1.90, a\mu_\sigma = 0.15$ et $a\mu_\delta = 0.19$							
A ₁	24	48	0.010	0.163255	$\simeq 343$	0.5	$\simeq 5000$
A ₂	32	64	0.003	0.163272	$\simeq 1045$	1	$\simeq 5400$
A ₃	32	64	0.004	0.163270	$\simeq 976$	1	$\simeq 5000$
A ₄	32	64	0.005	0.163267	$\simeq 855$	1	$\simeq 5000$
$N_f = 2 + 1 + 1, \beta = 1.95, a\mu_\sigma = 0.135$ et $a\mu_\delta = 0.17$							
B ₁	32	64	0.0025	0.161242	$\simeq 972$	1	$\simeq 5800$
B ₂	32	64	0.0035	0.161240	$\simeq 866$	1	$\simeq 5200$
B ₃	32	64	0.0055	0.161236	$\simeq 769$	1	$\simeq 5600$
B ₄	32	64	0.0075	0.161232	$\simeq 777$	1	$\simeq 5600$
$N_f = 2 + 1 + 1, \beta = 2.00, a\mu_\sigma = 0.13$ et $a\mu_\delta = 0.16$							
C ₁	32	64	0.0025	0.15935	$\simeq 874$	1	$\simeq 500$
C ₂	32	64	0.0025	0.15950	$\simeq 944$	1	$\simeq 1500$
C ₃	32	64	0.0025	0.15943	$\simeq 956$	1	$\simeq 1000$
$N_f = 2 + 1 + 1, \beta = 2.10, a\mu_\sigma = 0.12$ et $a\mu_\delta = 0.135$							
D ₁	48	96	0.002	0.1560	$\simeq 2585$	2	$\simeq 130$
D ₂	48	96	0.002	0.1575	$\simeq 2493$	2	$\simeq 200$
D ₃	48	96	0.002	0.15635	$\simeq 2934$	2	$\simeq 150$
$N_f = 2 + 1 + 1, \beta = 2.10, a\mu_\sigma = 0.12$ et $a\mu_\delta = 0.1385$							
D ₄	48	96	0.002	0.15637	$\simeq 3270$	2	$\simeq 400$
D ₅	48	96	0.002	0.156357	$\simeq 2993$	2	$\simeq 300$
D ₆	48	96	0.003	0.156355	$\simeq 3287$	2	$\simeq 450$

TAB. 1 – Temps de calcul pour différents ensembles $N_f = 2$ et $N_f = 2 + 1 + 1$.

et $T=96$. C'est ce que la machine de l'IDRIS nous a permis de faire.

13.1 Réglage des paramètres de HMC

La première simulation à $\beta = 4.2$ a débuté pour $a\mu = 0.002$ et $\kappa = 0.154079$. Ces valeurs ont été extrapolées à partir des simulations précédentes, celles faites aux autres valeurs de β . Il a tout d'abord fallu régler les paramètres de l'algorithme HMC, en particulier la masses des pseudofermions et les pas d'intégration associés pour avoir un temps par trajectoire le plus court possible en conservant une acceptation raisonnable, de l'ordre de 70% ou plus.

Le tableau 2 montre comment cet ajustement a été réalisé. Ce tableau contient des informations extraites du fichier output.data produit durant le run. Les lignes, dont le nombre a été limité à quatre pour des raisons de place, correspondent à des exemples de trajectoire de l'algorithme HMC. La première colonne est ΔE qui conditionne l'acceptation. Les trois colonnes suivantes sont le nombre d'itérations de l'inverseur pour chaque pseudofermion cumulées sur la trajectoire. La cinquième colonne indique si la nouvelle configuration est acceptée. La dernière colonne est le temps de calcul d'une trajectoire en secondes.

Si on note N_1, N_2, N_3 le nombre de pas d'intégration le long d'une trajectoire pour les pseudofermions, on écrit

$$N_1 = p_1 \quad N_2 = p_2 N_1 \quad N_3 = p_3 N_2$$

et p_1, p_2, p_3 sont, avec les masses des pseudofermions $a\mu_1, a\mu_2, a\mu_3$, les paramètres ajustables. La valeur de la masse $a\mu_1 = 0.000616292$ est restée inchangé au cours de la phase de réglage.

Les variables $a\mu_2, a\mu_3$ existent dans le fichier de paramètres du programme hmc_tm, quant aux variables p_1, p_2, p_3 elles s'appellent respectivement IntegrationStepsMu, IntegrationStepsMu2 et IntegrationStepsMu3.

- L'étape 0 correspond à des réglages déduits de simulations précédentes. Pour que le préconditionnement réalisé à l'aide des pseudofermions supplémentaires (2 et 3) soit efficace il faut ajuster les paramètres de telle façon que le nombre d'itérations ajoutées par les pseudofermions 2 et 3 soit comparable à celui du pseudofermion 1.
- A l'étape 1 on a changé $a\mu_2 = 0.006 \rightarrow 0.004$ d'où une augmentation de $Iter_{PF2}$ car on a dégradé le conditionnement de la matrice pour le pseudofermion 2.
- A l'étape 2 on a diminué $p_3 = 4 \rightarrow 2$ d'où une diminution par un facteur 2 de $Iter_{PF3}$.
- Le changement $a\mu_3 = 0.015 \rightarrow 0.6$ de l'étape 3 est manifestement excessif car ΔE est devenu énorme ce qui détruit le taux d'acceptation, rendant le gain sur $Iter_{PF3}$ illusoire.
- A l'étape suivante (4) on choisi plutôt $a\mu_3 = 0.1$ pour obtenir un ΔE acceptable et diminuer $Iter_{PF3}$ de façon conséquente. On observe alors un bon équilibre entre le nombre d'itérations des trois pseudofermions.
- A la dernière étape (5) on diminue $p_1 = 8 \rightarrow 6$ ce qui diminue le nombre d'itérations pour tous les pseudofermions et permet de gagner encore un peu de temps sur le calcul d'une trajectoire.

ΔE	$Iter_{PF3}$	$Iter_{PF2}$	$Iter_{PF1}$	Accept ?	Temps
Étape 0 : $p_1 = 8, p_2 = 2, p_3 = 4, a\mu_2 = 0.006, a\mu_3 = 0.015$					
-0.063690909743	129110	35672	64124	1	2.248617e+03
-0.840537784993	128967	35804	63973	1	2.245809e+03
0.983610592782	128913	35679	64692	1	2.249849e+03
-0.066652511060	129149	35887	64706	1	2.251917e+03
Étape 1 : $p_1 = 8, p_2 = 2, p_3 = 4, a\mu_2 = 0.004, a\mu_3 = 0.015$					
-0.147937482596	129091	50654	63667	1	2.337092e+03
0.086066944898	128812	50667	63798	1	2.336808e+03
-0.321683216096	129263	50481	62978	1	2.332510e+03
0.091465905309	129173	50523	63112	1	2.333994e+03
Étape 2 : $p_1 = 8, p_2 = 2, p_3 = 2, a\mu_2 = 0.004, a\mu_3 = 0.015$					
-0.325899706781	64581	50503	64387	1	1.884818e+03
0.132209266722	64699	50535	64303	1	1.885217e+03
-0.016051366925	64625	50416	63922	1	1.882407e+03
-0.132483968139	64732	50534	63769	1	1.882527e+03
Étape 3 : $p_1 = 8, p_2 = 2, p_3 = 2, a\mu_2 = 0.004, a\mu_3 = 0.6$					
19192722686.650	3455	35265	30090	0	1.168698e+03
27178448556.159	3450	37843	33177	0	1.200295e+03
26991659514.694	3448	38763	33821	0	1.209182e+03
26241720902.096	3438	44385	38447	0	1.267133e+03
Étape 4 : $p_1 = 8, p_2 = 2, p_3 = 2, a\mu_2 = 0.004, a\mu_3 = 0.1$					
0.274082553387	12850	50439	64021	1	1.581420e+03
0.261914351583	12834	50543	64495	1	1.584956e+03
0.505265848338	12803	50697	64119	0	1.583981e+03
0.189582473040	12850	50831	64140	1	1.585916e+03
Étape 5 : $p_1 = 6, p_2 = 2, p_3 = 2, a\mu_2 = 0.004, a\mu_3 = 0.1$					
-0.827198591828	9635	38029	49048	1	1.388675e+03
-0.373120075464	9650	38073	48710	1	1.384625e+03
0.122277741134	9650	38010	48949	1	1.385727e+03
-0.352468526364	9646	38120	48419	1	1.383148e+03

TAB. 2 – Exemple de réglage des paramètres de l'algorithme HMC.

$a\mu$	κ	am_π	af_{PS}	am_{PCAC}	Nmeas	r_0/a
$48^3 \times 96$						
0.002	0.154073	0.0740(3)	0.0398(2)	0.00006(6)	431	8.295(45)
0.002	0.154073	0.0734(12)	0.0401(4)	0.00006(6)	3150	
$32^3 \times 64$						
0.0065	0.154073	0.1326(5)	0.0465(3)	-0.00032(11)	522	8.008(29)
0.0065	0.154073	0.1315(5)	0.0465(2)	-0.00029(13)	4213	

TAB. 3 – Quantités diverses mesurées à $\beta = 4.2$. La 2ème ligne provient des mesures au vol. On rappelle que $f_{PS} = \sqrt{2}f_\pi$.

On voit qu’avec le réglage final on a gagné un facteur $\simeq 2$ sur le temps de calcul d’une trajectoire tout en gardant un bon taux d’acceptance qui sur l’ensemble des trajectoires est de 72.5%.

13.2 Ajustement de κ

Comme expliqué dans les chapitres précédents il est nécessaire d’ajuster la valeur de κ pour annuler m_{PCAC} . Pour cela on utilise la mesure au vol des corrélateurs pseudoscalaire-pseudoscalaire et axial-pseudoscalaire qui permettent de suivre l’évolution de m_{PCAC} au cours du run. Après un temps de thermalisation, les premières mesures ont montré que m_{PCAC} était faible et négative. Il a alors été décidé, tout en laissant se poursuivre le run à cette valeur de κ , de commencer un nouveau jeu de paramètres avec un κ légèrement différent $\kappa = 0.154073$. Après une thermalisation très courte car nous avons repris une des dernières configurations produites pour $\kappa = 0.154079$, les premières valeurs de m_{PCAC} ont été toujours proches de zéro mais positives. Pendant ce temps la valeur de m_{PCAC} pour le run avec $\kappa = 0.154079$ a changé de signe pour devenir positive. Le run avec $\kappa = 0.154073$ a lui aussi été marqué par des oscillations du signe de m_{PCAC} . Au final, la conclusion a été que l’effet du changement de κ sur m_{PCAC} était compatible avec les fluctuations statistiques. Le reste de la simulation a été fait avec $\kappa = 0.154073$.

Nous avons ensuite démarré une nouvelle simulation avec une masse lourde $a\mu = 0.0065$ pour augmenter la masse du pion. Ceci a permis de réduire la taille du réseau qui n’a été que de $32^3 \times 64$ pour cette simulation. La masse PCAC mesurée en ce point est plus élevée qu’à $a\mu = 0.002$ mais reste inférieure à $a\mu/10$.

Suivant la stratégie choisie par la collaboration pour $N_f = 2$ nous avons conservé la valeur de κ critique obtenue à la valeur de μ la plus faible. La valeur de κ critique ne dépend donc que de β . Cette procédure préserve l’amélioration d’ordre $\mathcal{O}(a)$ et garde les erreurs en $\mathcal{O}(a^2)$ petites [20, 48].

Une dernière série de configurations a été produite sur un petit volume physique correspondant à un réseau de taille $24^3 \times 48$ avec l’idée de les utiliser pour déterminer les constantes de renormalisation sans avoir à utiliser de gros réseaux sur lesquels les inversions sont coûteuses.

Des résultats préliminaires obtenus pour $\beta = 4.2$ sont regroupés dans le tableau 3.

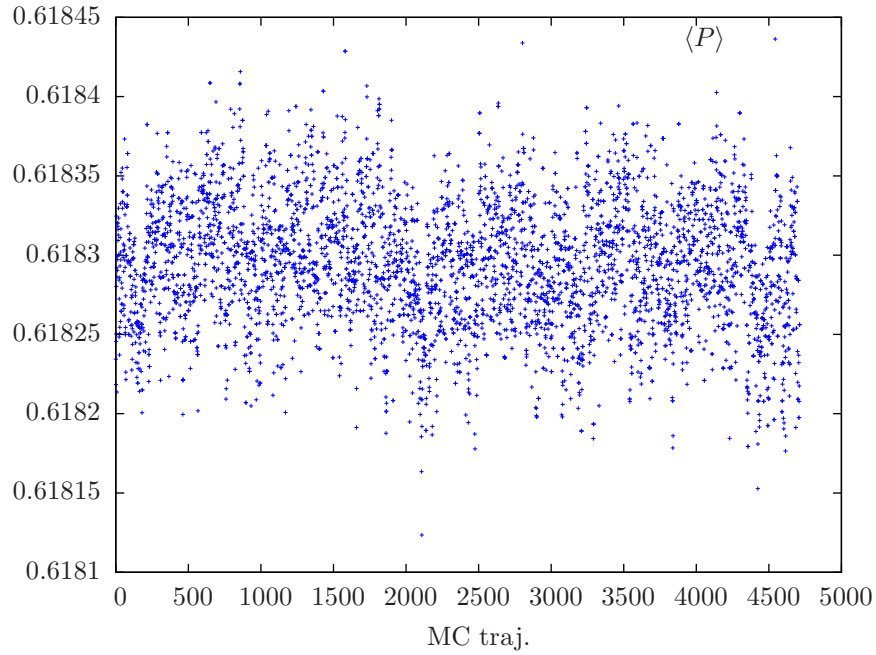


FIG. 20 – Histoire Monte Carlo de la plaquette pour $\beta = 4.2$, $L = 48$ et $a\mu = 0.002$.

Dans ce tableau, comme dans la suite de la thèse, la masse du pion (chargé) sera notée indifféremment m_π ou m_{PS} . La constante de désintégration notée f_{PS} est par contre reliée à f_π par la relation $f_{PS} = \sqrt{2}f_\pi$. Les deux valeurs de μ disponibles ne permettent malheureusement pas de tenter une quelconque extrapolation chirale. Il faudrait pour cela réaliser une simulation pour au moins une autre masse μ intermédiaire entre 0.002 et 0.0065. Cela n'a pas été fait jusqu'à présent car les ressources disponibles ont été concentrées sur les simulations $N_f = 2 + 1 + 1$.

A masse de pion fixée, cette nouvelle valeur de la maille permet un meilleur contrôle de l'extrapolation vers la limite du continu des quantités physiques, ce qui était une motivation des simulation à $\beta = 4.2$. L'exemple de la masse du nucléon sera montré à la section 19.

13.3 Contrôle de la simulation $N_f = 2$

Pour aucune des simulations à $\beta = 4.2$, l'histoire Monte Carlo de la plaquette ne présente d'ondes de fluctuation de longue période comme cela peut se voir pour certaines simulations avec une maille grossière et une masse de pion faible (voir figure 29).

La figure 21 montre l'histogramme de la plaquette sur les trajectoires thermalisées d'un run à $\beta = 4.2$. La distribution des valeurs suit approximativement une loi gaussienne, et ne présente pas un double maximum qui pourrait être le signe d'une transition de phase.

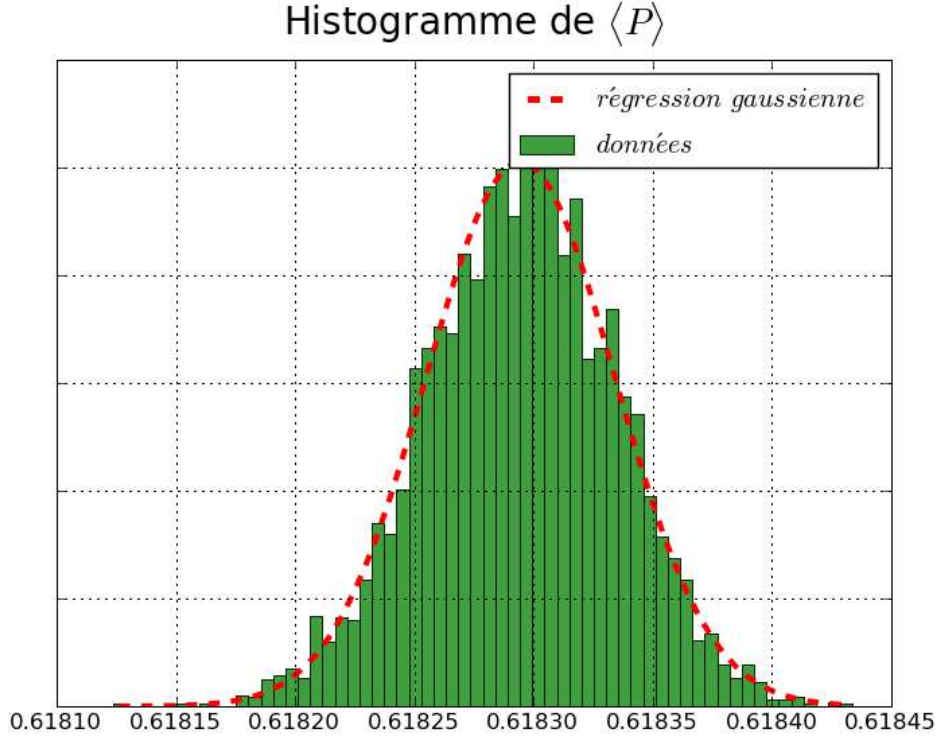


FIG. 21 – Histogramme de la plaquette pour $\beta = 4.2$, $L = 48$, $\kappa = 0.154073$ et $a\mu = 0.002$.

14 $N_f = 2 + 1 + 1$

Afin d'analyser l'influence du quark s dans la mer, comme par exemple le contenu étrange du nucléon, il faut disposer de configurations de jauge dans lesquelles l'effet des boucles de quarks s a été pris en compte. Dans la formulation twisted mass, pour laquelle les quarks sont inclus sous la forme de doublet, il est nécessaire d'introduire aussi le quark c . Vu la grande différence de masse entre quarks s et c , il n'est pas raisonnable de les introduire sous la forme d'un doublet dégénéré comme pour u et d . Les simulations comportant ces quatre saveurs de quarks, dont le principe a été expliqué dans la sous-section 10.5, sont appelées $N_f = 2 + 1 + 1$.

Les premières simulations $N_f = 2 + 1 + 1$ [28] ont été réalisées sur des réseaux de taille $12^3 \times 24$ et $16^3 \times 32$ pour explorer ce nouveau domaine. Les simulations sur des réseaux plus grands ont démarré vers fin 2007. Le centre de calcul du CEA (CCRT) et les ApeNEXT françaises à Rome ont servi à quelques runs de réglage des paramètres qui sont maintenant κ , et μ_σ , μ_δ qui sont les paramètres qui contrôlent les masses twistées des quarks s et c (voir équation (22)). La production massive de configurations a été faite grâce à la BlueGene/P de l'IDRIS. La figure 22 montre une vue globale des essais de réglage des paramètres.

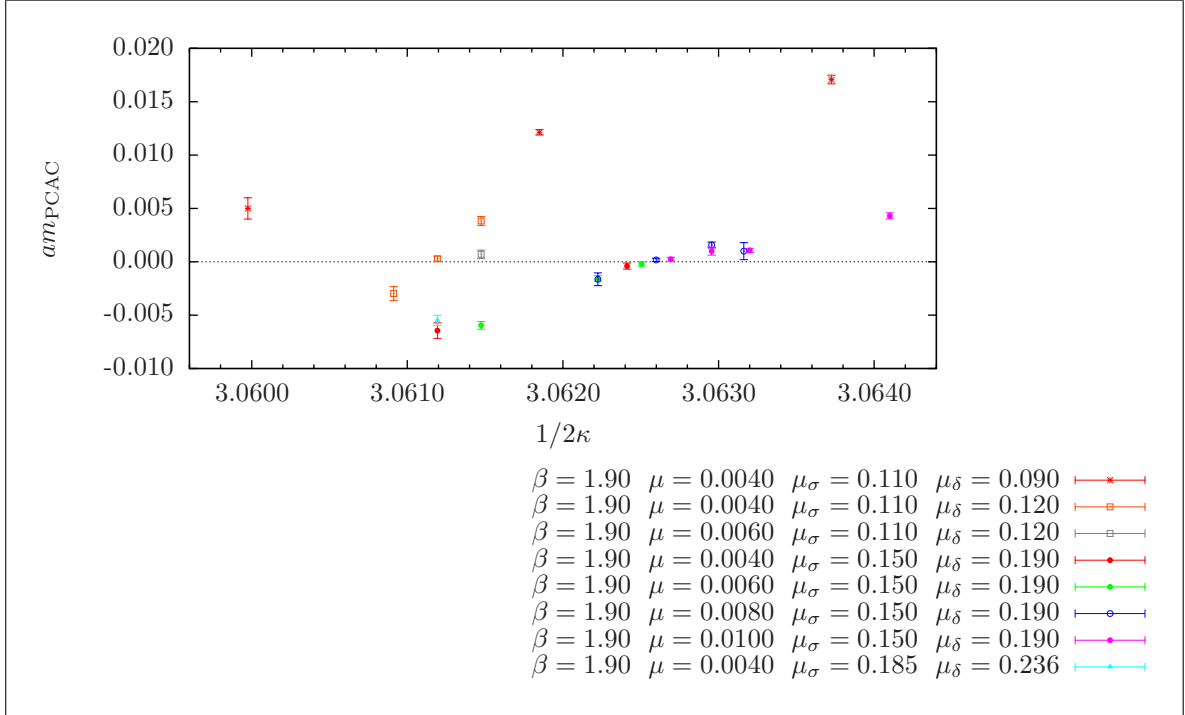


FIG. 22 – Vue globale des runs de réglage pour $N_f = 2 + 1 + 1$ et $\beta = 1.90$. Pour être exact ce ne sont pas μ , μ_σ et μ_δ qui devraient figurer dans la légende, mais plutôt $a\mu$, $a\mu_\sigma$ et $a\mu_\delta$.

14.1 Réglage des paramètres de PHMC

Comme dans le cas de deux saveurs dégénérées des paramètres algorithmiques sont à régler. Le doublet dégénéré u,d continue à utiliser l’algorithme HMC mais, comme expliqué lors de la sous-section 10.5, le doublet s,c utilise une variante nommée PHMC. Cette variante rajoute plusieurs paramètres dont l’intervalle choisi pour l’approximation polynomiale, le degré du polynôme et la précision de l’approximation.

Expliquons comment ces paramètres sont optimisés. On devine d’abord un intervalle $[\tilde{s}_{min}, \tilde{s}_{max}]$ qui encadre le spectre de l’opérateur de Dirac que l’on veut approximer. Pour des raisons historiques on normalise l’opérateur en le divisant par \tilde{s}_{max} de sorte que son spectre est maintenant contenu dans $[\epsilon = \tilde{s}_{min}/\tilde{s}_{max}, 1]$. Le but de l’ajustement des paramètres de l’algorithme PHMC est de trouver une approximation polynomiale de $1/\sqrt{x}$ de degré pas trop élevé pour diminuer le temps de calcul d’une trajectoire. Pour cela il faut un intervalle d’approximation le moins étendu possible mais qui encadre bien le spectre de l’opérateur. Ceci est contrôlé à la fin de la trajectoire en calculant les valeurs propres minimales λ_{min} et maximale λ_{max} de l’opérateur normalisé. On devra avoir

$$\epsilon \lesssim \lambda_{min} \text{ et } \lambda_{max} \lesssim 1$$

De plus pour conserver une bonne acceptance il faut s’assurer que ΔE reste petit.

Le tableau 4 montre un exemple typique d’optimisation. Pour chaque étape, les lignes correspondent à des trajectoires successives. La configuration de jauge qui a servi de point de départ des étapes 1, 2 et 3 est la même.

- Dans le tableau 4, l’étape 0 présente les réglages initiaux pour la simulation D_2

λ_{min}	λ_{max}	\tilde{s}_{min}	\tilde{s}_{max}	ΔE	Temps
Étape 0 : PhmcPrecisionPtilde=1.0e-8 et PhmcDegreeOfP=150					
6.77065e-05	9.11808e-01	4.8e-05	2.4	0.252356536686	2.493645e+03
6.77065e-05	9.11808e-01	4.8e-05	2.4	0.585199601948	2.434194e+03
7.04924e-05	9.11813e-01	4.8e-05	2.4	-0.045156940818	2.440829e+03
7.12095e-05	9.10942e-01	4.8e-05	2.4	-0.117765024304	2.408151e+03
Étape 1 : PhmcPrecisionPtilde=1.0e-8 et PhmcDegreeOfP=80					
7.67853e-05	9.95679e-01	8.8e-05	2.2	0.234440043569	2.164594e+03
7.42394e-05	9.94058e-01	8.8e-05	2.2	-0.304846443236	2.114743e+03
6.73826e-05	9.93466e-01	8.8e-05	2.2	-0.053029663861	2.107566e+03
7.17698e-05	9.96080e-01	8.8e-05	2.2	0.271479755640	2.145315e+03
Étape 2 : PhmcPrecisionPtilde=1.0e-8 et PhmcDegreeOfP=80					
7.16087e-05	9.11140e-01	9.6e-05	2.4	0.085884153843	2.169326e+03
6.94883e-05	9.12992e-01	9.6e-05	2.4	-0.259798295796	2.092156e+03
6.94371e-05	9.11624e-01	9.6e-05	2.4	0.180394001305	2.098684e+03
7.30202e-05	9.12752e-01	9.6e-05	2.4	0.073998413980	2.100859e+03
Étape 3 : PhmcPrecisionPtilde=1.0e-8 et PhmcDegreeOfP=80					
7.41329e-05	9.51238e-01	9.2e-05	2.3	0.322399944067	2.177396e+03
7.28076e-05	9.50807e-01	9.2e-05	2.3	-0.126342661679	2.108315e+03
7.28076e-05	9.50807e-01	9.2e-05	2.3	1.223950043321	2.111139e+03
7.28076e-05	9.50807e-01	9.2e-05	2.3	0.784500516951	2.109213e+03

TAB. 4 – Exemple de réglage des paramètres de l'algorithme PHMC.

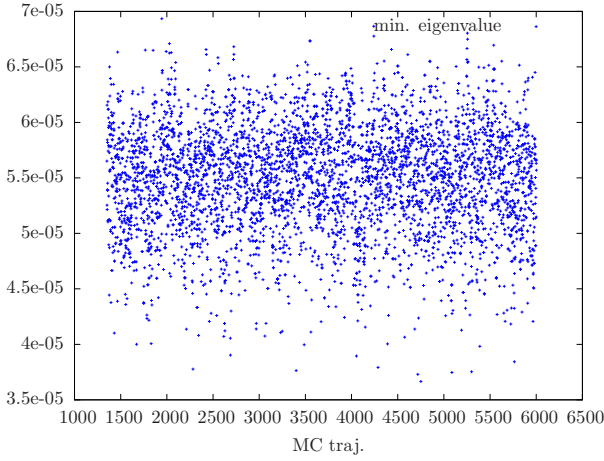


FIG. 23 – Valeur propre minimale lors de l’histoire Monte Carlo de l’ensemble $\beta = 1.9$, $L = 24$, $\kappa = 0.163255$ et $a\mu = 0.010$.

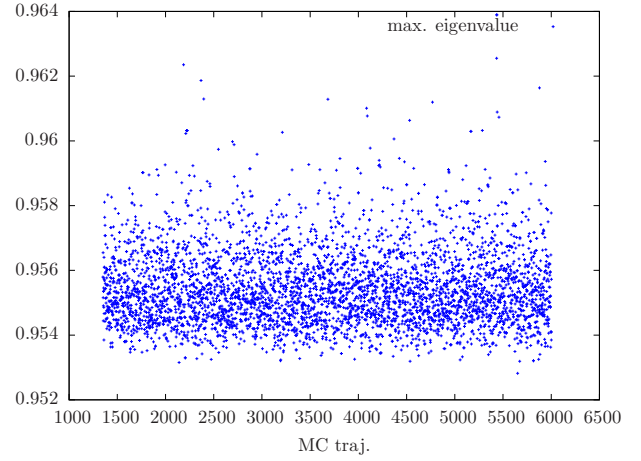


FIG. 24 – Valeur propre maximale lors de l’histoire Monte Carlo de l’ensemble $\beta = 1.9$, $L = 24$, $\kappa = 0.163255$ et $a\mu = 0.010$.

qui a été la première entreprise pour $N_f = 2 + 1 + 1$ avec $\beta = 2.1$.

- L’étape 1 correspond à un changement du degré du polynôme, de \tilde{s}_{max} et ϵ . Le temps de calcul a diminué, ΔE est raisonnable mais λ_{max} s’approche dangereusement de 1.
- La correction apportée dans l’étape 2 sur \tilde{s}_{max} a été trop importante car λ_{max} est maintenant très loin de 1.
- Avec la valeur intermédiaire choisie dans l’étape 3 on tombe sur une situation satisfaisante.

Il est important de laisser une marge plus grande entre λ_{min} et ϵ qu’entre λ_{max} et 1, car λ_{min} fluctue plus que λ_{max} . Les figures 23 et 24 montrent ces fluctuations.

14.2 Création du polynôme

Dans le fichier de paramètres du programme `phmc_tm` du code `tmLQCD`, les paramètres correspondant sont

- `PhmcStildeMax` et `PhmcStildeMin` (notés respectivement \tilde{s}_{max} et \tilde{s}_{min}) pour l’intervalle
- `PhmcDegreeOfP` pour le degré du polynôme
- `PhmcPrecisionPtilde` pour la précision

Le paramètre `PhmcDegreeOfP` fait référence au degré du polynôme employé dans le hamiltonien qui régit la dynamique moléculaire. Ce polynôme est lu depuis deux fichiers `Square_root_BR_roots.dat` et `normierungLocal.dat` qui doivent être créés avant. Le programme `chebyRoot` présent dans le code `tmLQCD` dans le répertoire `hmc/util/laguer/` permet de produire ces fichiers. Ce programme fait appel à la librairie `CLN` (Class Library for Numbers) qui permet de faire des calculs en virgule flottante avec une très grande précision.

Par exemple, pour créer le polynôme utilisé dans la simulation A_2 il suffit de choisir dans le fichier `chebyRoot.H` les valeurs suivantes

```
#define MAXORD 1000
#define DIGIT 1600
int MAXPOW = 150;
cl_F ALPHA = "0.500e+0_1600",
EPSILON = "0.00002e+0_1600",
LAMBDA = "1.e+0_1600";
```

Le paramètre MAXPOW est en fait PhmcDegreeOfP. Le format “e+0_1600” permet de définir les constantes avec une précision de 1600 décimales c’est-à-dire la valeur de DIGIT. Si l’on change la valeur de DIGIT il faut changer le format de toutes les constantes !

Le polynôme utilisé pour le calcul de la différence d’énergie qui entre en jeu dans le test d’acceptance est lui déterminé au début du programme phmc_tm. Son degré, suivant la précision demandée à travers le paramètre PhmcPrecisionPtilde, est couramment de l’ordre de 1800 car il doit être plus précis que le polynôme pour la dynamique moléculaire.

Lors du run un fichier phmc.data est produit, dont seules les quatre dernières colonnes sont reproduites dans le tableau 4. Les deux dernières colonnes viennent du fichier output.data.

Le tableau 5 montre les valeurs qui ont été retenues pour la production des configurations de jauge.

Identifiant	PhmcPrecisionPtilde	PhmcDegreeOfP	\tilde{s}_{max}	\tilde{s}_{min}
A ₁	1.0e-9	150	2.470	0.0000741
A ₂	1.0e-8	150	2.4	0.000048
A ₃	1.0e-8	150	2.4	0.000048
A ₄	1.0e-9	150	2.4	0.000072
B ₁	1.0e-8	150	2.4	0.000048
B ₂	1.0e-8	150	2.4	0.000048
B ₃	1.0e-8	150	2.4	0.000048
B ₄	1.0e-8	150	2.4	0.000048
C ₁	1.0e-8	150	2.4	0.000048
C ₂	1.0e-8	150	2.3	0.000046
D ₁	2.0e-9	80	2.25	0.0001
D ₂	2.0e-9	80	2.25	0.0001
D ₃	2.0e-9	80	2.25	0.0001
D ₄	1.0e-8	150	2.4	0.000048

TAB. 5 – Paramètres utilisés avec algorithme PHMC pour les différents ensembles.

14.3 Ajustement de κ

On procède de la même manière que pour $N_f = 2$ sauf que maintenant on cherche le κ critique pour chaque valeur de μ . La première simulation $N_f = 2 + 1 + 1$ faite sur

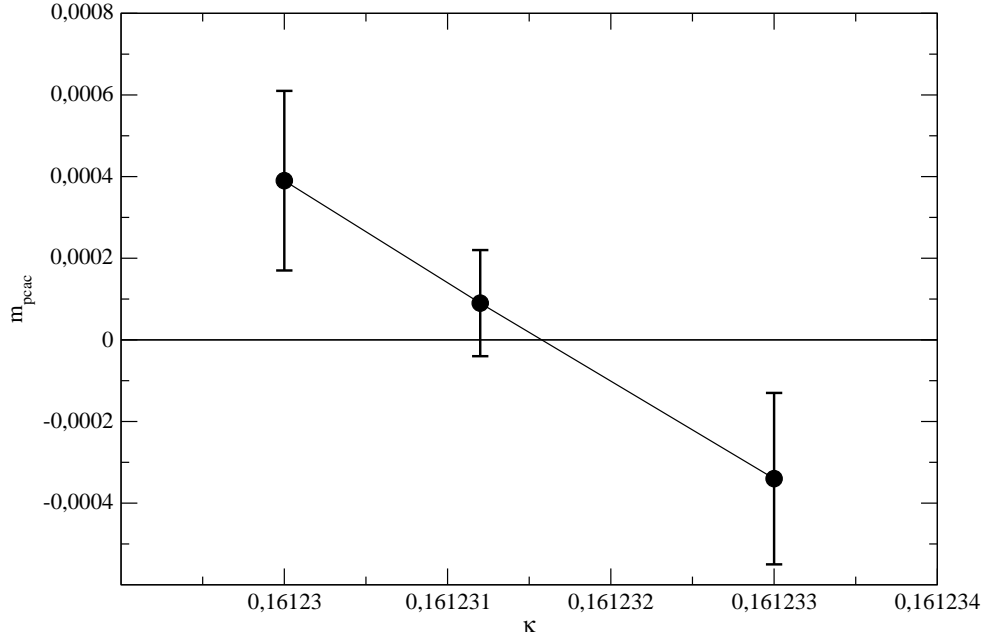


FIG. 25 – Exemple de l’ajustement de κ pour annuler m_{PCAC} pour l’ensemble $L=24$, $\beta = 1.95$ et $a\mu = 0.0085$. La valeur de κ retenue sera la valeur centrale qui est $\kappa = 0.1612312$.

la machine de l’IDRIS fut $\beta = 1.90$, $a\mu = 0.01$ et $L=24$, ce qui correspond à l’ensemble noté A_1 dans les tableaux. Pour ce jeu de paramètres nous avons continué la simulation débutée par Gregorio Herdoiza sur une autre machine. La deuxième simulation fut celle de l’ensemble B_2 qui avait été commencée par Siebren Reker. Ensuite les autres ensembles A_i et B_i présentés dans le tableau 1 ont été successivement lancés. Pour tous ces cas, les essais résumés dans la figure 22 ont permis de choisir par interpolation une valeur de κ qui rend m_{PCAC} au moins 10 fois plus petite que chaque μ . Pour les simulations à $\beta = 2.0$ et $\beta = 2.1$ il y a une phase de réglage car les simulations aux autres paramètres ne permettent pas de trouver du premier coup le κ critique. Il y a ainsi déjà eu deux tentatives à $\beta = 2.0$ et quatre à $\beta = 2.1$. La figure 25 montre plus précisément les essais de κ faits pour $\beta = 1.95$ et $a\mu = 0.0085$. Les figures 26 et 27 montrent, pour chaque μ , la valeur de m_{PCAC} correspondant aux valeurs de κ de le tableau 6.

14.4 Contrôle de la simulation

Pour les simulations à faible β , petit μ et sur les plus petits réseaux on observe des fluctuations de grande période comme on peut le voir sur la figure 29. Ceci peut être une indication de la proximité d’une transition de phase. Le temps d’autocorrélation τ_{int}^{plaq} de la plaquette visible dans le tableau 6 augmente fortement pour $a\mu = 0.004$. Ce temps diminue lorsque le volume du réseau est augmenté de $24^3 \times 48$ à $32^3 \times 64$ tout en laissant fixe les autres paramètres. Pour les analyses, il a été convenu que lorsque deux volumes étaient disponibles pour deux jeux de paramètres identiques, le volume le plus important serait choisi.

Au contraire, comme on le voit sur la figure 28 une simulation avec une maille plus fine, une masse de pion plus élevée et un volume plus grand, ne présente pas de

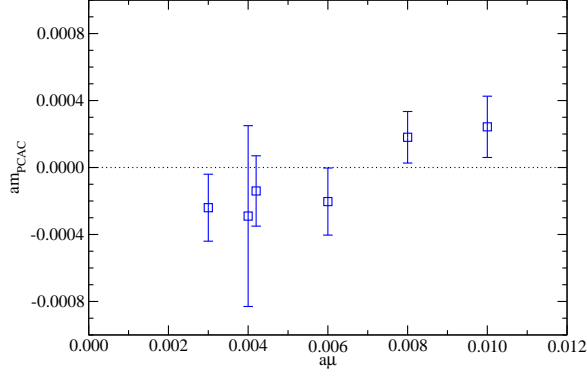


FIG. 26 – m_{PCAC} en fonction de $a\mu$ pour $\beta = 1.90$. Pour $a\mu = 0.004$, il y a deux volumes différents, décalés pour plus de clarté.

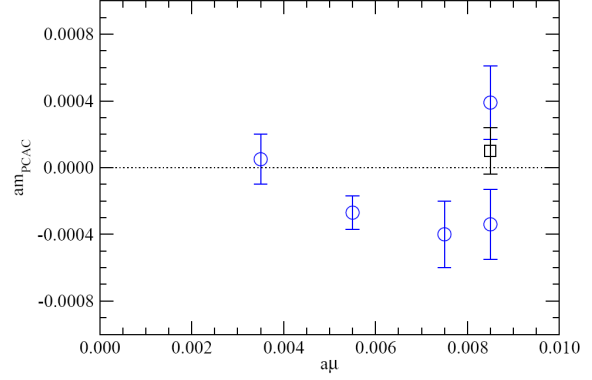


FIG. 27 – m_{PCAC} en fonction de $a\mu$ pour $\beta = 1.95$. Le point noir à $a\mu = 0.0085$ correspond au κ retenu pour cette valeur de $a\mu$.

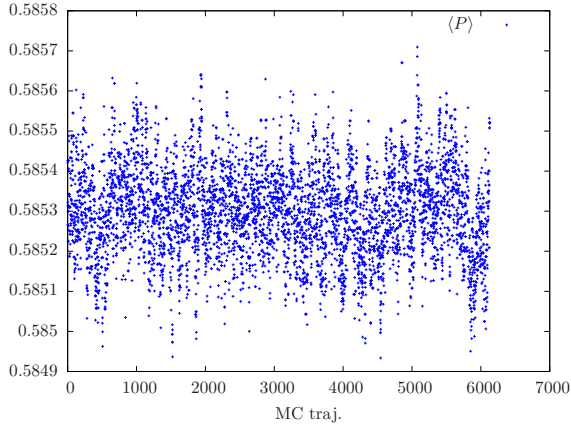


FIG. 28 – Histoire Monte Carlo de la plaquette pour l'ensemble $\beta = 1.95$, $L = 32$, $\kappa = 0.161236$ et $a\mu = 0.0055$.

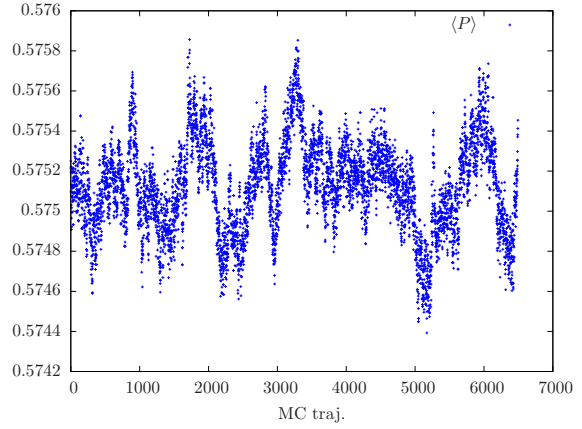


FIG. 29 – Histoire Monte Carlo de la plaquette pour l'ensemble $\beta = 1.9$, $L = 32$, $\kappa = 0.163272$ et $a\mu = 0.003$.

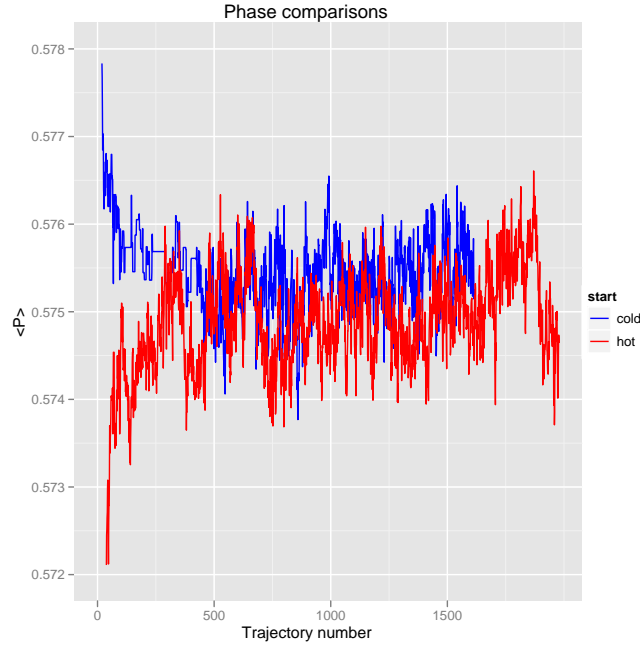


FIG. 30 – Comparaison de la valeur moyenne de la plaquette entre démarrage froid (bleu) et chaud (rouge).

fluctuations notables.

Un autre moyen de tester la proximité d’une éventuelle transition de phase est de regarder l’évolution de la valeur moyenne de la plaquette pour deux points de départ très différents (phénomène d’hystérésis). Le départ dit froid correspond au cas où l’on démarre d’une configuration pour laquelle toutes les variables de liens sont égales à l’identité. Le départ dit chaud correspond au cas où l’on démarre d’une configuration pour laquelle chaque variable de lien est une matrice aléatoire de $SU(3)$. La figure 30 montre un tel test. Après un temps de thermalisation on constate que les valeurs moyennes deviennent compatibles, alors qu’en cas de transition de phase chaque histoire Monte Carlo aurait pu avoir sa propre valeur d’équilibre pour la plaquette.

14.5 Secteur léger

Le tableau 6 présente les données obtenues dans le secteur léger pour $\beta=1.90$ et 1.95 , ce qui correspond respectivement à $a = 0.0853(5)\text{fm}$ et $a = 0.0785(7)\text{fm}$ si on utilise la constante de désintégration, aussi notée f_{PS} , $f_\pi \simeq 93$ MeV du pion pour fixer l’échelle. Les résultats physiques pour les simulations à $\beta = 2.0$ et $\beta = 2.1$ ne sont pas encore disponibles car le réglage du κ critique ainsi que celui des masses des quarks s et c en est à son début. Ces résultats sont particulièrement attendus en ce concerne la brisure d’isospin entre les pions. Comme on peut le voir dans le tableau 6, la brisure est encore très importante pour $\beta = 1.95$. Le pion neutre est environ 1.7 fois plus léger que le pion chargé.

On peut noter que les simulations visibles sur la vue globale 22 pour des valeurs de $1/2\kappa$ comprises entre 3.0624 et 3.0628, ont été continuées et correspondent aux points avec $\beta = 1.9$ et $L = 24$ dans le tableau 6. Le run à $a\mu = 0.0040$ et $L = 24$ s’est déroulé

$a\mu$	κ	τ_{int}^{plaq}	am_π	am_{PCAC}	af_{PS}	am_{π^0}
$24^3 \times 48, \beta = 1.90, a\mu_\sigma = 0.15 \text{ et } a\mu_\delta = 0.19$						
0.0040	0.163270	165(64)	0.145266(387)	-0.00029(54)	0.06541(33)	0.0787(42)
0.0060	0.163265	29(7)	0.172613(436)	-0.0002033(2003)	0.071688(226)	0.107(7)
0.0080	0.163260	21(5)	0.198583(413)	0.0001805(1540)	0.076229(218)	0.1306(88)
0.0100	0.163255	17(4)	0.222755(406)	0.000243(183)	0.079239(187)	
$32^3 \times 64, \beta = 1.90, a\mu_\sigma = 0.15 \text{ et } a\mu_\delta = 0.19$						
0.0030	0.163272	106(60)	0.12358(48)	-0.00024(20)	0.06483(40)	
0.0040	0.163270	94(39)	0.14141(40)	-0.00014(21)	0.06767(26)	
0.0050	0.163267		0.15720(42)	-0.00027(11)	0.07108(27)	
$32^3 \times 64, \beta = 1.95, a\mu_\sigma = 0.135 \text{ et } a\mu_\delta = 0.17$						
0.0035	0.161240	55	0.12621(45)	0.000055(56)	0.06052(24)	0.077(1)
0.0055	0.161236		0.15503(26)	-0.00042(6)	0.06590(17)	
0.0075	0.161232		0.1804(4)	-0.0004(2)	0.0691(2)	
$24^3 \times 48, \beta = 1.95, a\mu_\sigma = 0.135 \text{ et } a\mu_\delta = 0.17$						
0.0085	0.1612312		0.1937(6)	0.00009(13)	0.0700(3)	

TAB. 6 – Mesures de diverses observables pour le secteur léger. On rappelle que $f_{PS} = \sqrt{2}f_\pi$.

en deux temps. Dans un premier temps, environ 5000 trajectoires thermalisées ont été produites puis au vu du temps d'autocorrélation très long de la plaquette il a été décidé de poursuivre sur 5000 trajectoires supplémentaires.

La figure 31 montre comment f_π est affectée par le passage de $N_f = 2$ à $N_f = 2+1+1$ pour deux volumes. Les quantités m_π et f_π sont multipliées par le paramètre de Sommer r_0 pour que la comparaison ait un sens. On n'observe pas de différence significative ce qui n'est pas une surprise.

La partie gauche de la figure 32 illustre la variation du carré de la masse du pion (chargé) en fonction de la masse twistée légère. On observe le comportement linéaire prédit par la formule de Gell-Mann, Oakes, Renner. La partie droite montre l'extrapolation chirale $SU(2)$ de la constante de désintégration du pion correspondant à l'expression [59, 32]

$$f_{PS}(L) = F [1 - 2\xi\tilde{g}_1(\lambda)] [1 - 2\xi \log(2B_0\mu/\Lambda_4^2)] , \quad (32)$$

où

$$\xi = 2B_0\mu/(4\pi F)^2, \quad \lambda = \sqrt{2B_0\mu L^2} . \quad (33)$$

La fonction $\tilde{g}_1(\lambda)$ qui contient des corrections de volume fini a été calculée pour la première fois par Gasser et Leutwyler dans la référence [59]. Les notations utilisées sont les mêmes que la référence [32]. Les corrections chirales NNLO sont supposées négligeables dans l'équation (32). Les trois paramètres inconnus B_0 , F et Λ_4 sont déterminés par le fit. Par défaut, c'est f_π qui est utilisé pour fixer l'échelle d'énergie dans notre collaboration.

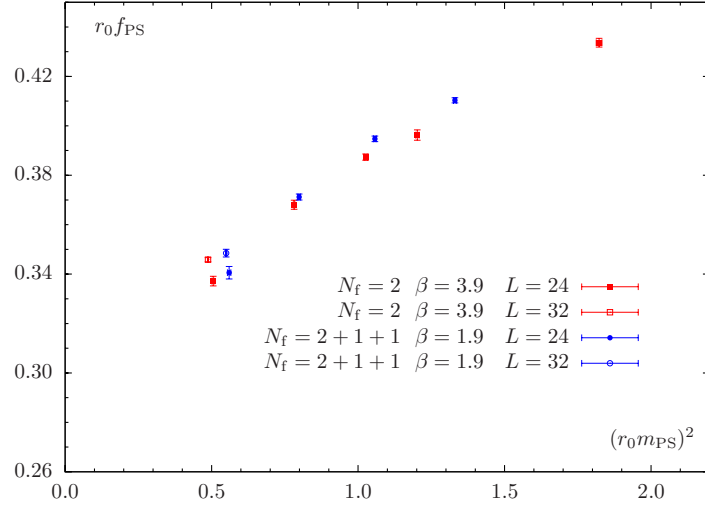


FIG. 31 – Comparaison pour $f_{PS} = \sqrt{2}f_\pi$ entre $N_f = 2$ et $N_f = 2 + 1 + 1$.

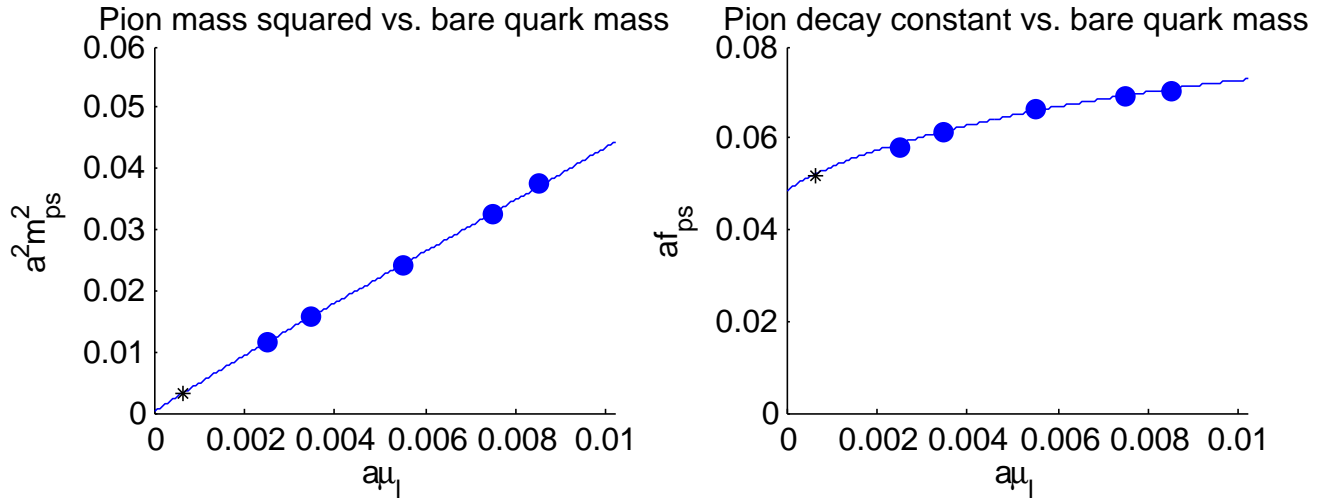


FIG. 32 – Extrapolations chirales à $\beta = 1.95$. On rappelle que $f_{PS} = \sqrt{2}f_\pi$.

$a\mu$	am_K	am_D	r_0/a
$24^3 \times 48, \beta = 1.90, a\mu_\sigma = 0.15 \text{ et } a\mu_\delta = 0.19$			
0.0040	0.258362(459)	0.938549(5022)	5.178(44)
0.0060	0.267566(539)	0.929509(7571)	5.209(58)
0.0080	0.278318(285)	0.926774(5254)	4.989(40)
0.0100	0.287855(394)	0.942718(4906)	4.864(21)
$32^3 \times 64, \beta = 1.90, a\mu_\sigma = 0.15 \text{ et } a\mu_\delta = 0.19$			
0.0030			5.217(30)
0.0040	0.257376(512)	0.921112(4447)	5.179(49)
0.0050			5.081(45)
$32^3 \times 64, \beta = 1.95, a\mu_\sigma = 0.135 \text{ et } a\mu_\delta = 0.17$			
0.0035	0.218913(682)	0.832210(5290)	5.616(31)
0.0055			5.662(33)
0.0075			5.566(44)
$24^3 \times 48, \beta = 1.95, a\mu_\sigma = 0.135 \text{ et } a\mu_\delta = 0.17$			
0.0085	0.244336(646)	0.860719(5138)	5.493(41)

TAB. 7 – Mesures de diverses observables pour le secteur lourd-léger et valeur de r_0/a .

14.6 Secteur lourd

Ce secteur, nouveau par rapport aux simulations $N_f = 2$, nécessite de régler deux paramètres supplémentaires qui sont μ_σ et μ_δ . Comme on peut le voir sur la vue globale 22 diverses valeurs ont été essayées. La qualité de l'ajustement de ces deux paramètres est mesurée par l'écart entre les masses calculées des mésons K et D et leur valeur physique $m_K \simeq 494$ MeV et $m_D \simeq 1870$ MeV.

Le tableau 7 rassemble les données que nous avons pour ce secteur. Sur les figures 33, 34, 35 et 36 le point noir correspond à la valeur expérimentale. Les figures 33 et 34 montrent la masse du K et l'extrapolation chirale linéaire. La valeur extrapolée à la masse physique du pion est en bon accord avec la valeur expérimentale pour $\beta = 1.95$ et dévie d'environ 20% pour $\beta = 1.90$. Les figures 35 et 36 montrent la masse du D et l'extrapolation chirale linéaire associée. La valeur extrapolée à la masse physique du pion pour $\beta = 1.90$ et $\beta = 1.95$ est environ 10% au-dessus de la valeur expérimentale. Dans l'ensemble le secteur lourd semble avoir été mieux ajusté à $\beta = 1.95$ qu'à $\beta = 1.90$.

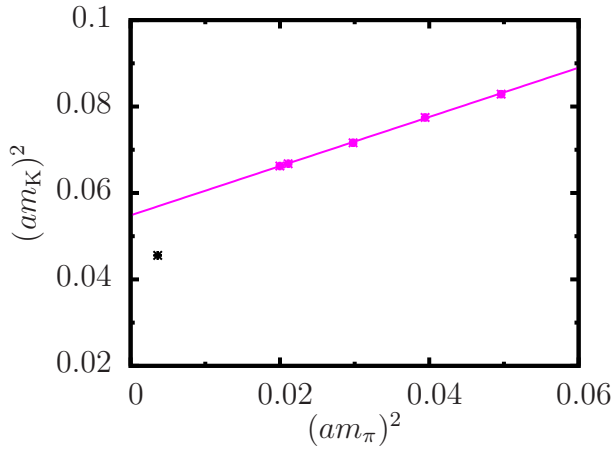


FIG. 33 – Masse du kaon en fonction de la masse du pion pour $\beta = 1.90$. La ligne violette correspond à l'extrapolation chirale linéaire.

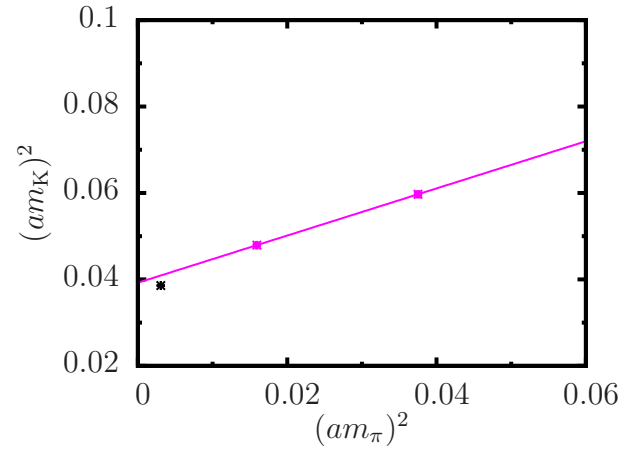


FIG. 34 – Masse du kaon en fonction de la masse du pion pour $\beta = 1.95$. La ligne violette correspond à l'extrapolation chirale linéaire.

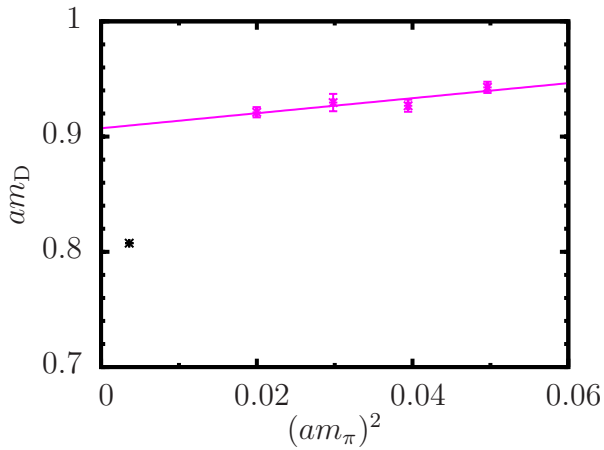


FIG. 35 – Masse du méson D en fonction de la masse du pion $\beta = 1.90$. La ligne violette correspond à l'extrapolation chirale linéaire.

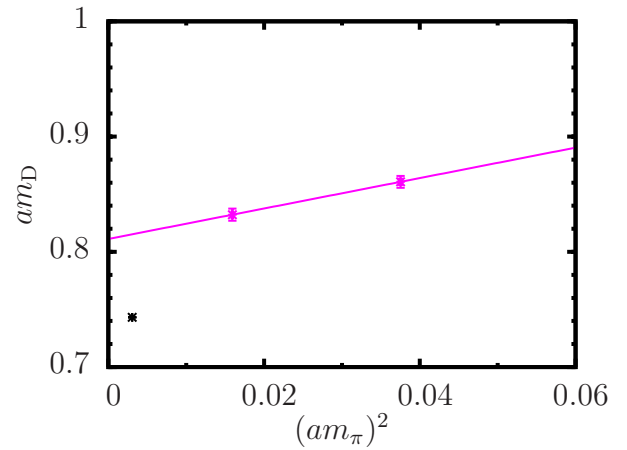


FIG. 36 – Masse du méson D en fonction de la masse du pion $\beta = 1.95$. La ligne violette correspond à l'extrapolation chirale linéaire.

Septième partie

Fonctions à 2 points pour le nucléon et le Delta

Sommaire

15 Champs interpolants	86
16 Mesure des masses	87
17 Calcul des corrélateurs	88
18 Smearing	89
18.1 Sur les champs de quarks	89
18.2 Calcul des propagateurs avec smearing	90
18.3 Smearing des liens de jauge	91
19 Résultats $N_f = 2$	93
19.1 Effets de volume fini	96
19.2 Limite du continu	97
19.3 Fits chiraux	100
20 Résultats préliminaires $N_f = 2 + 1 + 1$	102

Rappelons le principe de base de tout calcul sur réseau. Un corrélateur

$$\langle \mathcal{O}(t + \tau) \mathcal{O}(t) \rangle, \tau \geq 0$$

peut être évalué suivant l'intégrale fonctionnelle

$$\langle \mathcal{O}(t + \tau) \mathcal{O}(t) \rangle = \frac{1}{Z} \int [d\psi d\bar{\psi} dU] \mathcal{O}(t + \tau) \mathcal{O}(t) e^{-S[\psi, U]}$$

D'autre part on a

$$\langle \mathcal{O}(t + \tau) \mathcal{O}(t) \rangle = \langle 0 | \mathcal{O} e^{-H\tau} \mathcal{O} | 0 \rangle \quad (34)$$

$$= \sum_n |\langle 0 | \mathcal{O} | n \rangle|^2 e^{-M_n \tau} \quad (35)$$

Quand τ tend vers l'infini la somme est dominée par l'état N créé par l'opérateur \mathcal{O} et dont la masse est la plus basse. Implicitement on a supposé que \mathcal{O} est invariant par translation de sorte que l'énergie de l'état coïncide avec sa masse.

On peut généraliser à plusieurs opérateurs comme par exemple

$$\langle \mathcal{O}(t + \tau) \mathcal{A}(t + \tau') \mathcal{O}(t) \rangle = \langle \mathcal{O}(t) e^{-H(\tau - \tau')} \mathcal{A}(t) e^{-H\tau} \mathcal{O}(t) \rangle, \tau \geq \tau' \geq 0$$

dont l'expression est

$$\langle \mathcal{O}(t + \tau) \mathcal{A}(t + \tau') \mathcal{O}(t) \rangle = \frac{1}{Z} \int [d\psi d\bar{\psi} dU] \mathcal{O}(t + \tau) \mathcal{A}(t + \tau') \mathcal{O}(t) e^{-S[\psi, U]}$$

et la limite quand $\tau, \tau - \tau'$ tendent vers l'infini donne l'élément de matrice $\langle N | \mathcal{A} | N \rangle$ multiplié par le facteur (dit d'overlap) $|\langle 0 | \mathcal{A} | N \rangle|^2$.

L'opérateur initial peut être différent de l'opérateur final. Par exemple, si \mathcal{O} crée un pion d'impulsion k le corrélateur

$$\langle A_\mu^5(t + \tau, \vec{x}) \mathcal{O}(t) \rangle$$

permet de mesurer la constante de désintégration du pion définie par la relation

$$\langle 0 | A_\mu^5 | \pi(k) \rangle = -ik_\mu f_\pi e^{-ikx} \quad (36)$$

où A_μ^5 est le courant axial.

Remarquons que le raisonnement ci-dessus suppose que l'extension temporelle du réseau est infinie. Dans la suite nous expliquons comment le raisonnement doit être modifié quand cette extension est finie.

Les corrélateurs contenant n opérateurs sont appelées fonctions à n points. Ce chapitre détaille le calcul des fonctions à deux points et développe les applications au calcul de la masse des baryons (nucléon et Δ). L'opérateur \mathcal{O} qui crée l'état voulu est appelé *champ interpolant* et le premier travail est de construire ces champs pour les cas qui nous intéressent.

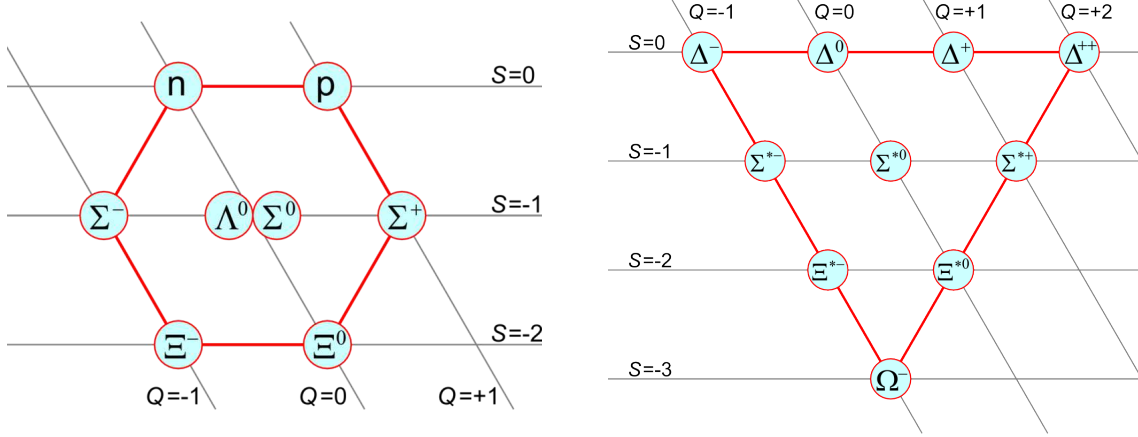


FIG. 37 – Particules de l’octet et du décuplet classées par charge Q et étrangeté S .

15 Champs interpolants

Les champs interpolants du nucléon c’est-à-dire le doublet d’isospin (p,n) de l’octet montré sur la figure 37 sont

$$\text{Proton} : J(x) = \epsilon_{abc} u_a^T(x) C \gamma_5 d_b(x) u_c(x) \quad (37a)$$

$$\text{Neutron} : J(x) = \epsilon_{abc} d_a^T(x) C \gamma_5 u_b(x) d_c(x) \quad (37b)$$

où u et d sont les champs des quarks u et d dans la base physique et C est la matrice de conjugaison de charge $C = \gamma_0 \gamma_2$. Pour le Δ c’est-à-dire le quadruplet d’isospin ($\Delta^{++}, \Delta^+, \Delta^0, \Delta^-$) du décuplet, les champs interpolants s’écrivent

$$\Delta^{++} : J_\mu(x) = \epsilon_{abc} u_a^T C \gamma_\mu u_b u_c \quad (38a)$$

$$\Delta^+ : J_\mu(x) = \frac{1}{\sqrt{3}} \epsilon_{abc} [2u_a^T C \gamma_\mu d_b u_c + u_a^T C \gamma_\mu u_b d_c] \quad (38b)$$

$$\Delta^0 : J_\mu(x) = \frac{1}{\sqrt{3}} \epsilon_{abc} [2u_a^T C \gamma_\mu d_b d_c + d_a^T C \gamma_\mu d_b u_c] \quad (38c)$$

$$\Delta^- : J_\mu(x) = \epsilon_{abc} d_a^T C \gamma_\mu d_b d_c \quad (38d)$$

De tels opérateurs créent une particule avec toutes les impulsions possibles. Pour sélectionner un état d’impulsion \vec{k} on construit

$$J(\vec{k}) = \frac{1}{V} \sum_{\vec{x}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{x}} J(x)$$

où V est le volume du réseau. Remarquons qu’en raison de l’invariance par translation du réseau on peut écrire

$$\langle J(\vec{k}) \bar{J}(\vec{k}) \rangle = \langle J(\vec{k}) \bar{J}(\vec{x} = 0) \rangle$$

De façon générale la conservation globale de l’impulsion supprime une sommation sur la position. Dans la suite on ne considère que des états d’impulsion nulle car cela est suffisant pour extraire les masses. Mais des calculs avec impulsion non nulle ont été réalisés pour vérifier que la relation de dispersion $E = \sqrt{k^2 + m^2}$ est bien satisfaite.

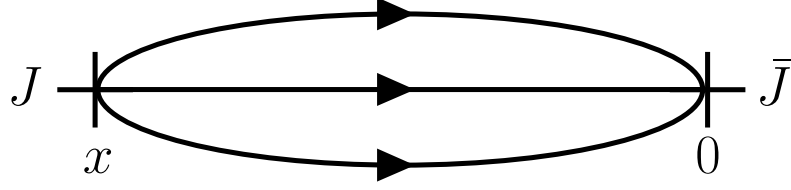


FIG. 38 – Diagramme correspondant à une fonction à 2 points pour un baryon.

16 Mesure des masses

Dans le champ interpolant du nucléon remarquons que les quarks u pour le proton, d pour le neutron ont un indice de Dirac libre. La notation précise pour cet opérateur est donc J_α et le corrélateur s'écrit

$$C_{\alpha\beta}(\tau) = \langle J_\alpha(\tau) \bar{J}_\beta(0) \rangle$$

où la barre au-dessus d'un opérateur signifie la conjugaison de Dirac. Définissons

$$C^\pm(\tau) = \sum_{\alpha\beta} (1 \pm \gamma_0)_{\alpha\beta} C_{\alpha\beta}(\tau)$$

Les symétries d'espace-temps de l'action et l'anti-périodicité pour les champs de fermions conduisent pour les corrélateurs avec impulsion nulle à la relation

$$C^+(\tau) = -C^-(T - \tau)$$

où T est l'extension temporelle totale du réseau. La combinaison appropriée pour extraire la masse du nucléon est donc

$$C_N(\tau) = C^+(\tau) - C^-(T - \tau)$$

qui tend vers $\exp(-m_N\tau)$ pour τ grand mais inférieur à $T/2$. En pratique, on définit la *masse effective*

$$m_N^{eff}(t) = -\log \frac{C(t)}{C(t-1)}$$

qui tend vers la masse du nucléon.

Dans le cas du Δ le champ interpolant comporte en plus de l'indice de Dirac libre, un indice spatio-temporel μ . Le champ interpolant est noté J_α^μ et le corrélateur est

$$C_{\alpha\beta}^{\mu\nu}(\tau) = \langle J_\alpha^\mu(\tau) \bar{J}_\beta^\nu(0) \rangle$$

De même que pour le nucléon, on définit

$$C^\pm(\tau) = \sum_{\alpha\beta} (1 \pm \gamma_0)_{\alpha\beta} \sum_{i=1}^3 C_{\alpha\beta}^{ii}(\tau)$$

et la combinaison appropriée est

$$C_\Delta(\tau) = C^+(\tau) - C^-(T - \tau)$$

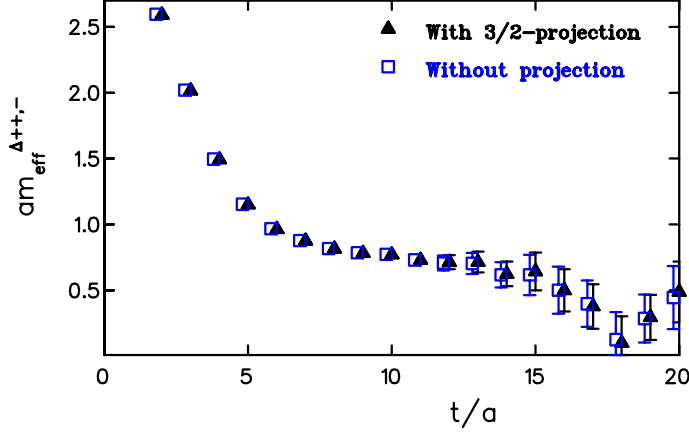


FIG. 39 – Comparaison pour la masse effective du Δ^{++} sur l'ensemble $\beta = 3.9$, $a\mu = 0.0085$ et $L = 24$ avec ou sans projection de spin. Les carrés vides ont été décalés par souci de clarté. 90 configurations de jauge ont été utilisées pour ce test.

Notons que les états intermédiaires qui contribuent au corrélateur pour le Δ ont a priori spin 1/2 ou 3/2. Cependant le Δ est un état d'isospin 3/2 donc la composante de spin 1/2 est forcément un état excité dont la contribution est négligeable lorsque τ est grand. Ceci a été testé explicitement [3] en insérant le projecteur sur le spin 3/2 dans le corrélateur. Comme on peut voir sur la figure 39, la différence entre les deux méthodes est plus faible que les barres d'erreurs.

17 Calcul des corrélateurs

Pour calculer les corrélateurs introduits dans la section précédente on a besoin d'évaluer

$$C_{\gamma\rho} = \langle J_\gamma(x) \bar{J}_\rho(0) \rangle$$

où l'opérateur est de la forme

$$J_\gamma(x) = \epsilon_{abc} \psi_{A,\alpha}^a(x) \Gamma_{\alpha\beta} \psi_{B,\beta}^b(x) \psi_{C,\gamma}^c(x) \quad (39)$$

où $\psi_{A,\alpha}^a(x)$ est le champ de quark de saveur A , de couleur a et d'indice de Dirac α et Γ est une matrice de Dirac qui dépend de la particule considérée (voir équations (37) et (38)). Si on introduit un indice global $g \equiv (A, \alpha, a)$, le champ interpolant peut s'écrire sous la forme

$$J(x) = \Lambda_{g_1 g_2 g_3} \chi_{g_1}(x) \chi_{g_2}(x) \chi_{g_3}(x)$$

où le tenseur Λ tient aussi compte du passage de la base physique à la base twistée. Ce tenseur dépend implicitement d'indices qui spécifient la structure du champ interpolant, c'est-à-dire l'indice de Dirac libre dans l'équation (39) et la structure en saveur. Si l'on écrivait explicitement Λ pour le proton on aurait :

$$\Lambda_{(A_1 \alpha_1 a_1, A_2 \alpha_2 a_2, A_3 \alpha_3 a_3)}^{\gamma, \text{proton}} = \delta(A_1, u) \delta(A_2, d) \delta(A_3, u) \delta(\alpha_3, \gamma) \epsilon_{a_1 a_2 a_3} \Gamma_{\alpha_1 \alpha_2}$$

La plupart du temps ces indices supplémentaires sont omis par alléger l'écriture et sont restaurés uniquement en cas de besoin.

Les règles de l'intégration fermionique donnent

$$\langle J(x)\bar{J}(0) \rangle = \frac{1}{Z} \int [dU] \det \mathcal{D}(U) e^{-S_g} \left[(-1)^\epsilon \Lambda_{g_1 g_2 g_3} \bar{\Lambda}_{g'_1 g'_2 g'_3} S_{g_1 g'_1}^U(x, 0) S_{g_2 g'_2}^U(x, 0) S_{g_3 g'_3}^U(x, 0) + \text{permutations} \right]$$

où ϵ est la parité de la permutation des champs de fermions. Dans l'expression précédente $S_{g_1 g'_1}^U(x)$ est le propagateur de quark dans le champ de jauge U défini par

$$\mathcal{D}_{g_1 g_2}^U(x, y) S_{g_2 g_3}^U(y, z) = \delta_{g_1 g_3} \delta(x, z)$$

Pour une configuration de jauge donnée le problème est donc de résoudre un système linéaire. Si on restaure le détail des indices, il s'écrit en omettant la dépendance implicite sur U pour simplifier

$$\mathcal{D}_{A, \alpha\beta}^{ab}(x, y) S_{A, \beta\gamma}^{bc}(y, z) = \delta^{ac} \delta_{\alpha\gamma} \delta(x, z)$$

où l'on ne somme pas sur l'indice A qui représente la saveur.

A cause du volume de calcul nécessaire, il est impossible de résoudre le système pour connaître le propagateur $S(y, z)$ quelque soit y et z . Le stockage serait également problématique. On arrange le calcul, en utilisant l'invariance par translation, pour n'avoir besoin du propagateur qu'en un seul point d'origine, c'est-à-dire z dans l'équation ci-dessus. Dans ce contexte notons la relation utile

$$S_{A, \alpha\beta}^{ab}(0, x) = (\gamma_5 S^\dagger \gamma_5)_{B, \alpha\beta}^{ab}(x, 0)$$

Le symbole dag dans l'équation ci-dessus ne s'applique qu'aux indices de Dirac et de couleur. Pour des fermions de Wilson, on aurait $A = B$, mais pour des fermions twistés il y a une permutation de saveur : si $A = u$ alors $B = d$.

18 Smearing

18.1 Sur les champs de quarks

Les champs interpolants de la section 15 créent des états qui n'ont pas forcément un grand recouvrement avec l'état propre de QCD qui nous intéresse. La conséquence est que la masse effective peut tendre lentement vers sa valeur asymptotique en raison de la contamination du corrélateur par les états excités. Pour améliorer cet état de fait il faudrait que l'état créé par le champ interpolant "ressemble" plus à l'état que l'on cherche. Une façon simple de réaliser cette amélioration est d'utiliser la technique du *smearing*, qui revient essentiellement à étaler les champs de quarks sur plusieurs sites. La seule difficulté est que ce smearing doit respecter l'invariance de jauge et les nombres quantiques des quarks. C'est à ce prix qu'on pourra considérer des champs interpolants dans lesquels les champs de quarks avec smearing sont simplement substitués aux champs de quarks locaux.

Il y a plusieurs choix possibles. Le type de smearing expliqué ci-dessous est le smearing gaussien [37]. Les lettres majuscules désigneront les champs de quarks avec smearing, les lettres minuscules désigneront les champs de quarks sans smearing.

Une façon générale d'écrire le smearing est :

$$Q_\alpha^a(x) = T_{\alpha\alpha'}^{aa'}(x, y, U_\mu) q_{\alpha'}^{a'}(y)$$

où

$$T_{\alpha\alpha'}^{aa'}(x, y, U_\mu) \quad (40)$$

est une matrice qui dépend du type de smearing employé. U_μ est ici présent pour souligner que la matrice T peut dépendre des variables de liens afin de conserver l'invariance de jauge. Si l'on traite les indices de couleur, de Dirac et les coordonnées comme un seul indice matriciel, la relation s'écrit

$$Q = Tq$$

On dérive une relation similaire pour le champ conjugué :

$$\bar{Q} = \bar{q}_\rho^{a'}(y)(\gamma_0)_{\rho\beta} T_{\eta\beta}^{*aa'}(x, y, U_\mu)(\gamma_0)_{\eta\alpha}$$

En notation matricielle la relation est :

$$\bar{Q} = \bar{q}\gamma_0 T^\dagger \gamma_0 = \bar{q} \tilde{T}$$

où \tilde{T} est défini par $\tilde{T} = \gamma_0 T^\dagger \gamma_0$

Dans notre cas le smearing est crée par réursion (c'est-à-dire que la matrice T est construite par applications successives d'une autre matrice F)

$$\begin{cases} Q^{(0)} &= q \\ Q^{(n)} &= FQ^{(n-1)} \end{cases}$$

où

$$F_{\beta\beta'}^{bb'}(x, y, U_\mu) = \frac{\delta_{\beta\beta'}}{1 + 6\alpha} \left[\delta^{bb'} \delta(x, y) + \alpha \sum_{\substack{\mu \text{ spatial} \\ \text{seulement}}} \left[U_\mu^{bb'}(x) \delta(x + \mu, y) + U_\mu^{\dagger bb'}(x - \mu) \delta(x - \mu, y) \right] \right]$$

Ici α est un coefficient choisi pour reproduire le rayon moyen de la particule à étudier par exemple un hadron. Le tableau 8 résume les paramètres utilisés pour le smearing gaussien suivant les ensembles que nous avons étudiés.

18.2 Calcul des propagateurs avec smearing

Ce smearing ne mélange pas les saveurs donc pour alléger les notations on ignore l'indice de saveur dans la discussion qui suit. Dans la pratique on peut appliquer le smearing au champ interpolant qui crée l'état (source), à celui qui le détruit (puits) ou aux deux. Si aucun smearing n'est appliqué, le corrélateur met en jeu le propagateur local-local (indice LL dans l'équation ci-dessous) dont on rappelle la définition

$$\mathcal{D}_{\alpha\beta}^{ab}(x, z) S_{LL, \beta\gamma}^{bc}(z, y_s) = \delta^{ac} \delta_{\alpha\gamma} \delta(x, y_s)$$

On appelle $\delta^{ac} \delta_{\alpha\gamma} \delta(x, y_s) = \Sigma_{L, \alpha\gamma}^{ac}(x, y_s)$ la source locale et on réserve dans la suite la variable y_s à la position de la source.

β	N_{gauss}	α_{gauss}
3.8	30	4.0
3.9	50	4.0
4.05	70	4.0
4.2	90	4.0
1.90	50	4.0
1.95	50	4.0

TAB. 8 – Paramètres utilisés pour le smearing gaussien suivant les ensembles $N_f = 2$ et $N_f = 2 + 1 + 1$.

Si on applique le smearing à la source on aura besoin du propagateur local-smeared défini par

$$S_{LS, \alpha\beta}^{ab}(x, y_s) = S_{LL, \alpha\gamma}^{ac}(x, y) \tilde{T}_{\gamma\beta}^{cb}(y, y_s)$$

ce qui a priori implique la connaissance du propagateur "all-to-all" c'est-à-dire $S_{LL}(x, y)$ pour tous les x et y .

Mais l'on peut aussi calculer le propagateur local-smeared en inversant l'opérateur de Dirac avec une source avec smearing. Pour cela appliquons l'opérateur de Dirac sur le propagateur local-smeared

$$\begin{aligned} \mathcal{D}_{\alpha\beta}^{ab}(x, z) S_{LS, \beta\gamma}^{bc}(z, y_s) &= \mathcal{D}_{\alpha\beta}^{ab}(x, z) S_{LL, \beta\eta}^{bd}(z, y) \tilde{T}_{\eta\gamma}^{dc}(y, y_s) \\ &= \Sigma_{L, \alpha\eta}^{ad}(x, y) \tilde{T}_{\eta\gamma}^{dc}(y, y_s) \end{aligned}$$

Le propagateur local-smeared est donc solution de l'équation de Dirac avec la source avec smearing

$$\Sigma_{S, \alpha\gamma}^{ac}(x, y_s) = \Sigma_{L, \alpha\eta}^{ad}(x, y) \tilde{T}_{\eta\gamma}^{dc}(y, y_s)$$

Si on applique le smearing au puits on aura besoin du propagateur smeared-local défini par

$$S_{SL, \alpha\beta}^{ab}(x, y_s) = T_{\alpha\gamma}^{ac}(x, y) S_{LL, \gamma\beta}^{cb}(y, y_s)$$

ce qui n'implique par de nouvelles inversions.

A partir des expressions précédentes, il est simple de combiner à la fois smearing à la source et au puits sur un propagateur. On inverse d'abord en utilisant une source avec smearing pour obtenir le propagateur local-smeared, puis on applique la procédure de smearing au puits qui nous fournit un propagateur smeared-smeared. Nous avons commencé notre travail sur les baryons avec des propagateurs locaux, mais l'amélioration de la qualité du signal procurée par l'utilisation du smearing comme on peut le voir sur la figure 40, nous a fait choisir des propagateurs smeared-smeared pour l'étude du nucléon et du Δ dont les résultats sont présentés dans la section 19.

18.3 Smearing des liens de jauge

Notons tout d'abord que le smearing que nous décrivons ci-dessous est appliqué aux liens de jauge qui entrent dans la construction de la matrice T (voir équation (40)). Ceux qui apparaissent dans l'action de QCD ne sont pas changés.

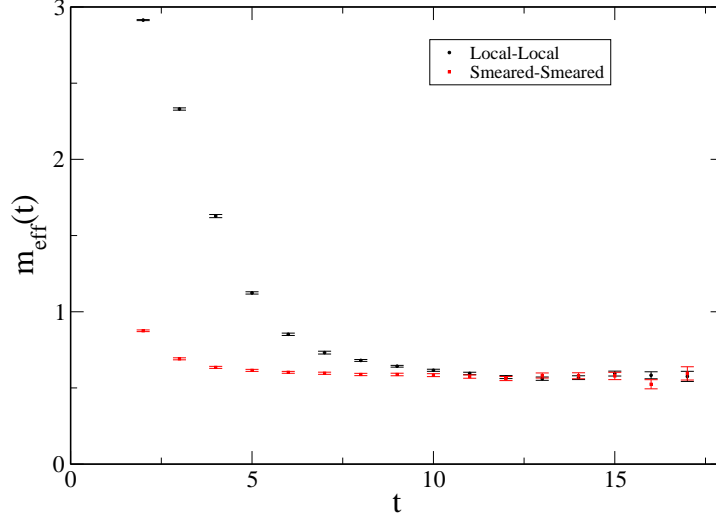


FIG. 40 – Comparaison sur 150 configurations de jauge environ des masses effectives pour le nucléon avec ou sans smearing sur l'ensemble $\beta = 3.9$, $L = 24$ et $a\mu = 0.0085$.

L'idée est de supprimer dans les liens de jauge les fluctuations de petites longueurs d'onde en les moyennant avec leurs plus proches voisins. Les méthodes populaires de smearing des liens de jauge sont le hypercubic (HYP) smearing [69], le stout smearing [97] et le smearing 3D APE [46, 2]. La méthode que nous avons utilisée est une méthode itérative proche du smearing 3D APE dont les étapes sont :

I) Initialisation à partir des liens originaux $U_\mu^{(0)}(x) = U_\mu(x)$

II) Construction du lien épaissi

$$U_\mu^{(n+1)}(x) = U_\mu^{(n)}(x) + \alpha_{APE} \sum_{\substack{\nu \neq \mu \\ \nu \text{ spatial}}} U_\nu^{(n)}(x) U_\mu^{(n)}(x + \nu) U_\nu^{(n)\dagger}(x + \mu)$$

dans les directions spatiales uniquement (c'est-à-dire pour $\mu \neq 0$). Cette étape vient du fuzzing [94]. Chaque élément de la somme s'appelle une agrafe. La somme comporte quatre termes car on inclut les agrafes dans les directions positives aussi bien que négatives.

III) "Projection" de $U_\mu^{(n+1)}(x)$ dans $SU(3)$

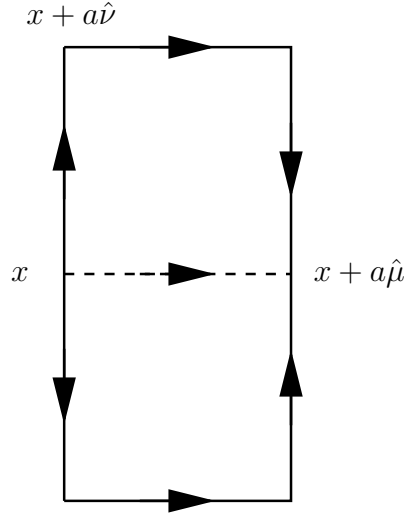
IV) On répète les étapes 2 et 3 un nombre N_{APE} de fois

Le choix de la "projection" dans $SU(3)$ n'est pas unique et plusieurs solutions ont été proposées dans la littérature. Etant donné une matrice M de taille 3×3 , sa projection U dans $SU(3)$ est souvent définie comme la matrice U appartenant à $SU(3)$ qui maximise $\text{Re Tr}(UM^\dagger)$. Une procédure itérative est ensuite nécessaire pour obtenir le maximum. Un autre choix est de prendre U telle que

$$U = M(M^\dagger M)^{-1/2} \det(M^{-1} M^\dagger)^{1/6}$$

C'est cette dernière solution pour laquelle nous avons opté. Suivant [83], nous avons utilisé les étapes suivantes pour projeter dans $SU(3)$ une matrice M donnée

1. On construit $H = M^\dagger M$

FIG. 41 – Lien (en pointillé) et ses 2 agrafes dans le plan $(\hat{\mu}, \hat{\nu})$.

2. H étant une matrice hermitienne, on peut la diagonaliser dans une base orthonormée à l'aide d'une matrice T pour écrire

$$H = T\Lambda T^\dagger$$

où $\Lambda = \text{diag}(\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3)$ contient les valeurs propres de H .

3. On construit $W = MH^{-1/2} = T\Lambda^{-1/2}T^\dagger$ qui est alors dans $U(3)$
4. On divise W par $\det(W)^{1/3}$. On choisit la valeur principale de la racine cubique pour éviter toute ambiguïté.

Cette façon de procéder est motivée par la décomposition polaire qui indique que toute matrice inversible complexe se décompose de façon unique en produit d'une matrice unitaire et d'une matrice hermitienne strictement positive. La référence [79] compare cette méthode et la technique de maximisation de la trace qui donne des résultats numériques très proches.

Nous avons utilisé $N_{APE} = 20$ et $\alpha_{APE} = 0.5$ pour tous les différents ensembles sur lesquels nous avons travaillé y compris les simulations $N_f = 2 + 1 + 1$.

19 Résultats $N_f = 2$

Dans cette section les résultats concernant la masse du nucléon et des particules Δ seront présentés. Pour les configurations de jauge $N_f = 2$ ce travail a déjà été publié [3], mais les configurations pour $\beta = 4.2$ n'étaient pas encore disponibles. Des résultats préliminaires pour les simulations $N_f = 2 + 1 + 1$ sont montrés, mais l'analyse ne peut être aussi approfondie que celle du cas $N_f = 2$ car la production des configurations de jauge est toujours en cours.

Les paramètres des ensembles $N_f = 2$ que nous avons utilisés, c'est-à-dire β , L et $a\mu$ sont résumés dans le tableau 10. Par commodité, nous répétons dans le tableau 9 les valeurs de la maille a en fonction de β déduites de la constante de désintégration du

$N_f = 2$		
β	a en fm	r_0/a
3.8	0.0995(7)	4.46(3)
3.9	0.0855(6)	5.22(2)
4.05	0.0666(6)	6.61(3)
4.2	0.0529(5)	8.42(7)
$N_f = 2 + 1 + 1$		
$\beta = 1.90$	$a = 0.0853(5)$ fm	
$\beta = 1.95$	$a = 0.0785(7)$ fm	

TAB. 9 – Valeur de la maille fixée par f_π pour les diverses simulations. La valeur de r_0/a à la limite chirale est aussi fournie pour les simulations $N_f = 2$.

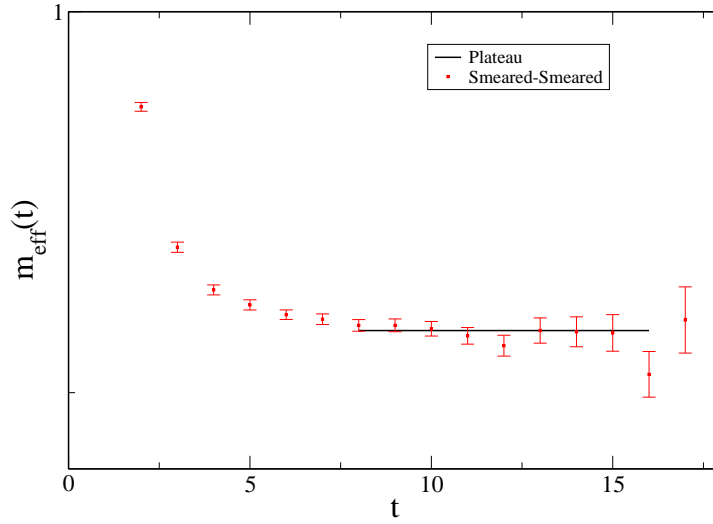


FIG. 42 – Exemple de masse effective pour le nucléon sur l'ensemble $\beta = 3.9$, $L = 24$ et $a\mu = 0.0085$. Pour cette figure, 348 configurations de jauge ont été utilisées.

pion ainsi que le paramètre de Sommer extrapolé à la limite chirale [125]. La fenêtre en β qui va de 3.8 à 4.2 est trop petite pour tester de façon significative les lois d'échelle asymptotique vues dans la section 5. Nous étudions la limite du continu en observant la dépendance de la masse du hadron en unités physiques en fonction de a/r_0 .

Les masses de pions couvrent un intervalle de 270 à 500 MeV [125]. Pour $m_\pi \approx 300$ MeV nous avons des réseaux dont la taille spatiale est de $L_s = 2.1$ fm et $L_s = 2.7$ fm pour $\beta = 3.9$ ce qui permet de tester les effets de volume fini.

Sur la figure 42 nous montrons un exemple de masse effective correspondant au corrélateur smeared-smeared pour le nucléon ainsi que la valeur asymptotique donnée par le plateau. Celui-ci est déterminé en fittant la masse effective par une constante dans la région du plateau et en variant le temps de début du fit pour que le χ^2 par degré de liberté soit inférieur à un.

Le tableau 11 rassemble les données brutes pour les masses du nucléon et des Δ en unités réseau en fonction de la masse nue du quark twisté pour trois valeurs de β . Les erreurs statistiques ont été calculées par la méthode jackknife [111] et la méthode

$\beta = 4.2, a = 0.0529(5) \text{ fm}$						
$32^3 \times 64, L_s = 1.69 \text{ fm}$	$a\mu$	0.0065				
	Stat.	522				
	$m_\pi \text{ (GeV)}$	0.4938(50)				
	$m_\pi L$	4.24				
$48^3 \times 96, L_s = 2.54 \text{ fm}$	$a\mu$	0.002				
	Stat.	431				
	$m_\pi \text{ (GeV)}$	0.2756(28)				
	$m_\pi L$	3.55				
$\beta = 4.05, a = 0.0666(6) \text{ fm}$						
$32^3 \times 64, L_s = 2.13 \text{ fm}$	$a\mu$	0.0030	0.0060	0.0080	0.012	
	Stat.	269	253	409	182	
	$m_\pi \text{ (GeV)}$	0.3070(18)	0.4236(18)	0.4884(15)	0.6881(18)	
	$m_\pi L$	3.31	4.57	5.27	7.43	
$\beta = 3.9, a = 0.0855(6) \text{ fm}$						
$24^3 \times 48, L_s = 2.05 \text{ fm}$	$a\mu$	0.0030	0.0040	0.0064	0.0085	0.010
	Stat.	-	782	545	348	477
	$m_\pi \text{ (GeV)}$	-	0.3131(16)	0.3903(9)	0.4470(12)	0.4839(12)
	$m_\pi L$		3.25	4.05	4.63	5.03
$32^3 \times 64, L_s = 2.74 \text{ fm}$	$a\mu$	0.0030	0.0040			
	Stat.	659	232			
	$m_\pi \text{ (GeV)}$	0.2696(9)	0.3082(6)			
	$m_\pi L$	3.74	4.28			
$\beta = 3.8, a = 0.0995(7) \text{ fm}$						
$24^3 \times 48, L_s = 2.39 \text{ fm}$	$a\mu$	0.0060	0.0080	0.0110	0.0165	
	Stat.					
	$m_\pi \text{ (GeV)}$	0.3667(17)	0.4128(16)	0.4799(9)	0.5855(10)	
	$m_\pi L$	4.44	5.00	5.81	7.09	

TAB. 10 – Paramètres d'entrée β, L, μ de nos simulations $N_f = 2$ avec la maille a et la masse du pion m_π correspondantes.

$a\mu$	stat.	am_N	$am_{\Delta^{++,-}}$	$am_{\Delta^{+,0}}$
$\beta = 3.9, 24^3 \times 48$				
0.0040	782	0.5111(58)	0.660(14)	0.670(13)
0.0064	545	0.5514(49)	0.709(11)	0.711(12)
0.0085	348	0.5786(67)	0.714(12)	0.733(13)
0.0100	477	0.5973(43)	0.7531(67)	0.7559(75)
$\beta = 3.9, 32^3 \times 64$				
0.0030	652	0.4958(43)	0.6234(139)	0.6497(133)
0.0040	232	0.5126(46)	0.651(16)	0.659(15)
$a\mu$	stat.	am_N	$am_{\Delta^{++,-}}$	$am_{\Delta^{+,0}}$
$\beta = 4.05, 32^3 \times 64$				
0.0030	269	0.4091(60)	0.5381(93)	0.5441(93)
0.0060	253	0.4444(47)	0.5505(77)	0.5581(90)
0.0080	409	0.4714(31)	0.5918(60)	0.5906(63)
$a\mu$	stat.	am_N	$am_{\Delta^{++,-}}$	$am_{\Delta^{+,0}}$
$\beta = 4.2, 32^3 \times 64$				
0.0065	380	0.380(3)	0.473(5)	0.477(5)
$\beta = 4.2, 48^3 \times 96$				
0.0020	273	0.306(4)	0.431(6)	0.433(7)

TAB. 11 – Masses du nucléon et des Δ mesurées sur les ensembles $N_f = 2$.

Γ [132].

Pour montrer comment se placent nos résultats par rapport à ceux des autres collaborations (LHPC [126] et PACS-CS [7]) nous montrons sur le figure 43 une comparaison à $\beta = 3.9$ de la masse du nucléon.

19.1 Effets de volume fini

Les volumes physiques que nous utilisons sont suffisamment grands pour que les effets de volume fini soient dominés par la distorsion du nuage pionique. L'hypothèse est évidemment que la masse du pion est suffisamment petite, ce qui est certainement le cas pour les plus petites masses. Ces corrections de volume fini ont été étudiées dans la référence [6] dans le cadre de la théorie des perturbations chirales $SU(2)$ [110]. Les effets de volume fini pour la masse du nucléon à l'ordre $\mathcal{O}(p^4)$ sont :

$$m_N(\infty) = m_N(L) - \delta m_a(L) - \delta m_b(L) \quad (41)$$

où

$$\begin{aligned} \delta m_a(L) &= \frac{3g_A^2 m_N^0 m_\pi^2}{16\pi^2 f_\pi^2} \int_0^\infty dx \sum_{\mathbf{n}} K_0 \left(L|\mathbf{n}| \sqrt{m_N^0 x^2 + m_\pi^2 (1-x)} \right) \\ \delta m_b(L) &= \frac{3m_\pi^4}{4\pi^2 f_\pi^2} \sum_{\mathbf{n}} \left[(2c_1 - c_3) \frac{K_1(L|\mathbf{n}|m_\pi)}{L|\mathbf{n}|m_\pi} + c_2 \frac{K_2(L|\mathbf{n}|m_\pi)}{(L|\mathbf{n}|m_\pi)^2} \right]. \end{aligned} \quad (42)$$

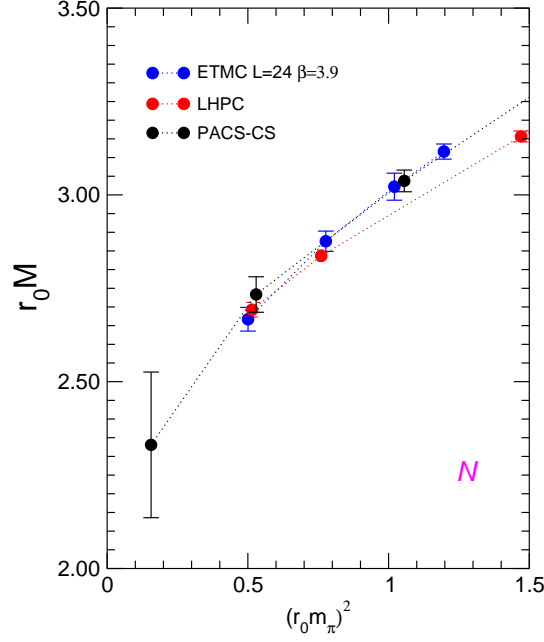


FIG. 43 – Comparaison des résultats ETMC avec ceux des collaborations LHPC et PACS-CS pour la masse du nucléon.

$K_\nu(x)$ est la fonction de Bessel modifiée et la somme porte sur tous les vecteurs d'entiers \mathbf{n} en excluant $\mathbf{n} = \mathbf{0}$. Les constantes de basse énergie de dimension deux $c_2 = 3.2 \text{ GeV}^{-1}$ et $c_3 = -3.45 \text{ GeV}^{-1}$ ont été déterminées respectivement dans [47] et [14, 109]. Les paramètres c_1 et m_N^0 sont tirés du fit chirale présenté dans la sous-section 19.3. Les résultats sont collectés dans le tableau 12. Comme on peut le voir les corrections sont, pour nos volumes de réseaux, extrêmement faibles ($\lesssim 1\%$) et la plupart du temps inférieures aux erreurs statistiques. Ceci est confirmé par le calcul sur réseau avec deux volumes différents ($24^3 \times 48$ et $32^3 \times 64$) pour $a\mu = 0.004$ (voir tableau 11). Pour le Δ les conclusions sont similaires.

19.2 Limite du continu

Pour faire cette extrapolation on doit exprimer toutes les quantités en unités physiques et prendre la limite $a \rightarrow 0$. Pour faciliter la comparaison avec d'autres calculs, nous choisissons comme unité physique le paramètre de Sommer r_0 , extrapolé à la limite chirale, car il est plus facile à calculer que la constante de désintégration du pion. Les valeurs de $r_0 m_\pi$ que nous avons ne sont pas tout à fait identiques pour les diverses valeurs de β , et donc de r_0/a . Nous avons donc effectué une interpolation pour ramener $m_N r_0$ et $m_\Delta r_0$ à une série de valeurs de référence de $r_0 m_\pi$ proches de celles dont nous disposons. Les résultats sont rassemblés dans le tableau 13 et montrés sur la figure 44. Nous avons pris la limite du continu $a/r_0 \rightarrow 0$ en ajustant une constante sur les données à $\beta=3.9$, 4.05 et 4.2 quand elles existent. En raison des instabilités lors de la production des configurations de jauge à $\beta = 3.8$, les résultats correspondants ne sont pas inclus dans l'extrapolation. Comme on peut le voir sur la figure, ils sont toutefois consistant avec notre extrapolation. La dernière partie du tableau 13 donne les valeurs extrapolées à la limite continu.

am_π	$am_N(L)$	$a\delta_a(L) + a\delta_b(L)$
$\beta = 3.9 \ 24^3 \times 48$		
0.1362	0.5111(58)	0.0068
0.1684	0.5514(49)	0.0046
0.1940	0.5786(67)	0.0026
0.2100	0.5973(43)	0.0021
$\beta = 3.9 \ 32^3 \times 64$		
0.1168	0.4958(34)	0.0014
0.1338	0.5126(46)	0.0011
$\beta = 4.05 \ 32^3 \times 64$		
0.1038	0.4091(60)	0.0035
0.1432	0.4444(47)	0.0018
0.1651	0.4714(31)	0.0012

TAB. 12 – Correction de volume pour la masse du nucléon sur les ensembles $N_f = 2$.

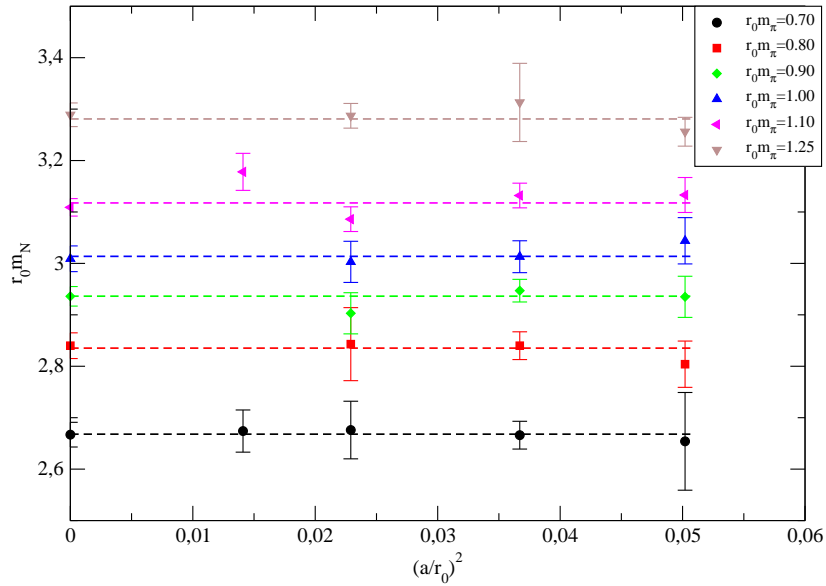


FIG. 44 – Extrapolation constante de la masse du nucléon à la limite du continu. L'extrapolation utilise 4 points dans le cas $r_0 m_\pi = 0.70$ et $r_0 m_\pi = 1.10$ soit un point de plus que dans les autres cas. Le point supplémentaire vient des nouvelles simulations à $\beta = 4.2$ avec respectivement $a\mu = 0.002$ et $a\mu = 0.0065$.

$r_0 m_\pi$	$r_0 m_N$		$r_0 m_{\Delta^{+-,-}}$		$r_0 m_{\Delta^{+,0}}$	
$\beta = 3.8$						
0.70	2.654(95)	2.668(55)	3.596(119)	3.511(69)	3.502(161)	3.528(79)
0.80	2.804(45)	2.807(41)	3.637(54)	3.614(47)	3.641(65)	3.652(53)
0.90	2.935(40)	2.933(27)	3.667(75)	3.701(28)	3.790(111)	3.760(30)
1.00	3.044(45)	3.043(21)	3.731(83)	3.767(31)	3.885(120)	3.850(33)
1.10	3.133(34)	3.129(31)	3.831(63)	3.804(57)	3.918(72)	3.915(64)
1.25	3.256(28)	3.201(63)	4.086(62)	3.793(111)	4.127(64)	3.950(127)
$\beta = 3.9$						
0.70	2.666(27)	2.672(17)	3.548(60)	3.481(35)	3.632(88)	3.498(46)
0.80	2.840(27)	2.809(13)	3.621(65)	3.614(25)	3.641(61)	3.633(32)
0.90	2.947(22)	2.933(12)	3.720(56)	3.734(16)	3.725(52)	3.754(20)
1.00	3.013(31)	3.041(14)	3.841(60)	3.837(18)	3.861(46)	3.859(17)
1.10	3.132(24)	3.125(20)	3.917(50)	3.916(30)	3.943(50)	3.938(31)
1.25	3.313(76)	3.194(33)	4.028(66)	3.976(56)	4.061(105)	4.000(62)
$\beta = 4.05$						
0.70	2.676(56)	2.665(47)	3.565(124)	3.428(81)	3.550(97)	3.477(71)
0.80	2.843(71)	2.795(36)	3.627(137)	3.571(59)	3.627(107)	3.609(51)
0.90	2.903(40)	2.910(24)	3.669(45)	3.701(35)	3.690(45)	3.727(30)
1.00	3.003(40)	3.007(16)	3.771(45)	3.815(18)	3.793(46)	3.827(18)
1.10	3.086(24)	3.079(19)	3.932(43)	3.905(35)	3.936(50)	3.902(37)
1.25	3.287(24)	3.126(42)	4.017(48)	3.982(85)	4.038(49)	3.953(84)
$\beta = 4.2$						
0.70	2.674(41)		3.684(60)		3.704(67)	
1.10	3.178(36)		3.971(53)		4.004(53)	
Continuum						
0.70	2.667(24)	2.671(16)	3.551(54)	3.472(32)	3.595(65)	3.492(38)
0.80	2.840(25)	2.807(12)	3.622(59)	3.608(23)	3.638(53)	3.626(27)
0.90	2.936(19)	2.929(11)	3.687(35)	3.728(15)	3.705(34)	3.746(16)
1.00	3.009(25)	3.025(11)	3.794(36)	3.826(13)	3.827(33)	3.844(12)
1.10	3.109(17)	3.101(14)	3.926(33)	3.916(23)	3.939(35)	3.924(24)
1.25	3.289(23)	3.168(26)	4.021(39)	3.978(47)	4.042(44)	3.984(50)

TAB. 13 – Les résultats d’une interpolation linéaire vers les $r_0 m_\pi$ de référence sont donnés dans les colonnes 2,4 et 6. Les colonnes 3,5 et 7 utilisent le fit chirale à l’ordre m_π^3 pour effectuer l’interpolation. Pour $\beta = 4.2$, on ne peut utiliser que l’interpolation linéaire. Une extrapolation constante a été utilisée pour atteindre la limite du continu.

Un des problèmes importants de la formulation twisted mass est la brisure d'isospin qui lève la dégénérescence en masse d'un même multiplet. Rappelons que ceci est un artefact d'ordre a^2 . Comme les corrélateurs sont réels et qu'ils sont invariants sous la transformation $u \leftrightarrow d$ combinée avec la conjugaison hermitique, les couples (n, p) , (Δ^{++}, Δ^-) et (Δ^+, Δ^0) sont dégénérés. Par contre, il existe a priori une différence de masse d'ordre a^2 entre Δ^{++} et Δ^+ . Comme on peut le voir dans le tableau 13 à la limite du continu cet effet est négligeable par rapport aux erreurs.

19.3 Fits chiraux

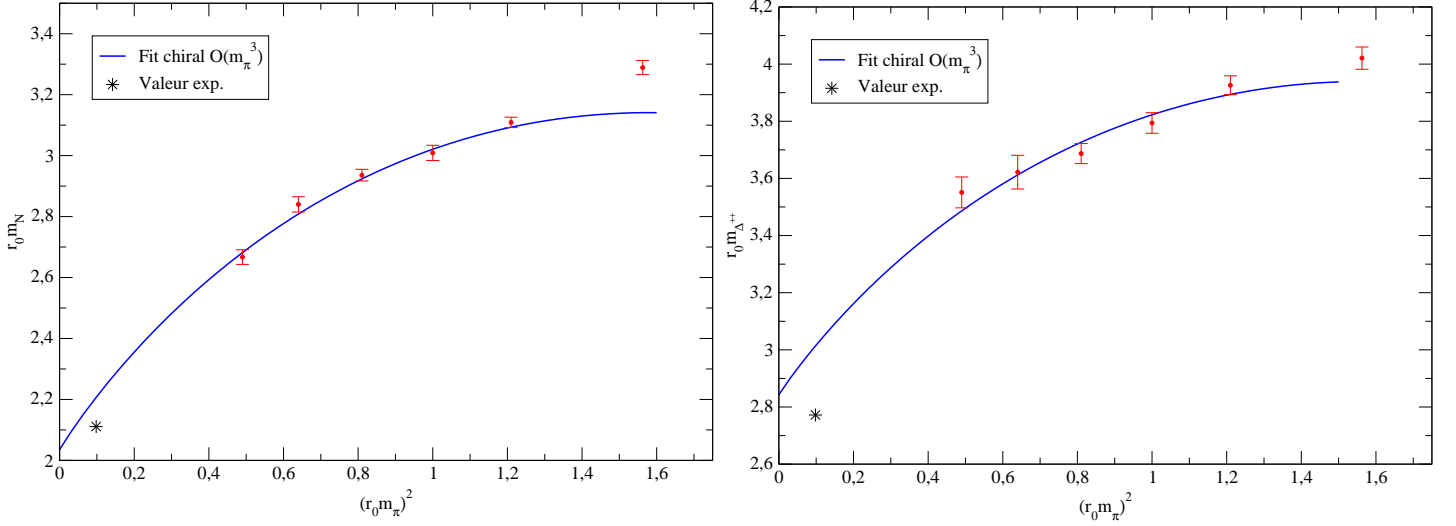
Comme on ne simule pas QCD à la masse du pion physique, la question de l'extrapolation se pose. Pour cela, on utilise la théorie des perturbations chirales qui est basée sur le fait que les masses des quarks u et d sont petites par rapport à une échelle hadronique typique. Si on omet le terme de masse du Lagrangien de QCD on a une théorie qui possède la symétrie chirale dont on sait qu'elle est spontanément brisée et que les modes de Goldstone associés peuvent être identifiés aux pions. Quand on développe la théorie de perturbation autour du point symétrique, on doit tenir compte non seulement du terme de brisure explicite, mais aussi de la dégénérescence entre un hadron et ce même hadron accompagné d'un pion d'impulsion nulle. Pour cela on pourrait utiliser les techniques des théorèmes de basse énergie [106] mais cela met en jeu un formalisme lourd et peu transparent. On préfère donc utiliser l'approche équivalente de la théorie effective [127, 58] dont les degrés de liberté sont des hadrons ponctuels et des pions. Elle est construite pour respecter la symétrie chirale avec un terme de brisure explicite qui est contraint par celui de QCD. Le terme symétrique ne dépend du champ de pion que par des puissances de ses dérivées. Pour pouvoir tronquer la théorie à un nombre fini de termes il faut se limiter à des situations où les impulsions des pions sont petites. La théorie de perturbation développée dans ce cadre est la théorie de perturbation chirale. Des revues récentes de la théorie de perturbation chirale appliquée au nucléon peuvent être trouvées dans [113, 12]. Elle permet de prédire comment se comportent les masses des hadrons en fonction de la masse du pion. Le développement pour le nucléon et le Δ sont de la forme

$$m_N(m_\pi) = m_N^0 - 4c_N^1 m_\pi^2 - \frac{3g_A^2}{32\pi f_\pi^2} m_\pi^3 + \dots \quad (43)$$

$$m_\Delta(m_\pi) = m_\Delta^0 - 4c_\Delta^1 m_\pi^2 - \frac{3g_A^2}{32\pi f_\pi^2} m_\pi^3 + \dots \quad (44)$$

où l'ellipse signifie que l'on a négligé les termes d'ordre supérieur. Le terme m_N^0 est la masse du nucléon à la limite chirale, le coefficient c_N^1 est relié au terme σ du nucléon. Le terme cubique, c'est-à-dire en $m_\pi^{3/2}$, est exactement prédit par la théorie comme tous les termes non analytiques dans la masse des quarks. Il provient de la région infrarouge de la self énergie pionique du nucléon. Les valeurs de la constante de couplage axiale du nucléon g_A et de f_π sont celles de la limite chirale. En pratique si on tronque le développement à l'ordre m_π^3 , la différence par rapport aux valeurs physiques $g_A = 1.2695(29)$ et $f_\pi = 92.42$ MeV va dans les termes d'ordre supérieur. Notons que l'égalité du terme cubique pour le nucléon et le Δ est valide dans la limite de la symétrie $SU(6)$.

L'introduction des termes d'ordre supérieur ne pose pas de problème de principe mais fait apparaître de nouveaux paramètres libres. Comme nos données semblent bien

FIG. 45 – Fits chiraux pour le nucléon et le Δ^{++} avec les formules (43) et (44).

	$r_0 m^0$	c^1/r_0	$r_0 m_{phys}$	$r_0 m_{exp}$
N	2.039(34)	-0.523(10)	2.209(35)	2.1105
Δ	2.891(72)	-0.511(20)	3.056(75)	2.772

TAB. 14 – Paramètres obtenus pour un fit avec les formules (43) et (44).

compatibles avec une troncation à l'ordre m_π^3 si nous excluons le point correspondant à la plus haute masse de pion, nous limitons la discussion qui suit à cet ordre. L'article [3] propose des extrapolations d'ordre supérieur qui conduisent aux mêmes résultats.

La figure 45 montre la qualité du fit que nous obtenons. Si nous réduisons encore le domaine du fit vers les plus petites masses le résultat ne change pas à l'intérieur des barres d'erreurs. Ce qui suggère que l'essentiel de la variation en fonction de m_π est bien décrite par le développement à l'ordre m_π^3 . Pour les points expérimentaux nous avons utilisé $r_0 = 0.444$ fm. Le tableau 14 récapitule les valeurs que nous obtenons pour les paramètres libres $m_{N,\Delta}^0$ et $c_{N,\Delta}^1$ ainsi que les valeurs des masses extrapolées au point physique. On observe une déviation de 5 % pour le nucléon et de 10 % pour le Δ .

La pente des masses en fonction de m_π^2 est aussi une observable intéressante, puisqu'elle est reliée au terme σ , c'est-à-dire la valeur moyenne du terme de brisure de symétrie, qui au moins pour le nucléon est mesurable à partir de la diffusion pion-nucléon. Il est défini par

$$\sigma_N = \langle N | m_u \bar{u}u + m_d \bar{d}d | N \rangle \quad (45)$$

$$\simeq \hat{m} \langle N | \bar{u}u + \bar{d}d | N \rangle \quad (46)$$

$$= \hat{m} \frac{\partial N}{\partial \hat{m}} \quad (47)$$

$$= m_\pi^2 \frac{\partial N}{\partial m_\pi^2} \quad (48)$$

où on a utilisé successivement le théorème de Feynman-Hellman et la relation de Gell-Mann, Oakes, Renner. En utilisant la valeur de c_1 déterminée lors du fit du nucléon, nous trouvons au point physique $\sigma_N = 66.7 \pm 1.3$ MeV, où l'erreur indiquée est statistique.

$\beta = 1.90, a\mu_\sigma = 0.15$ et $a\mu_\delta = 0.19, a = 0.0853(5)$ fm					
$24^3 \times 48, L_s = 2.05$ fm	$a\mu$	0.0040	0.0060	0.0080	0.0100
	Stat.	$\simeq 400$	$\simeq 400$	$\simeq 400$	$\simeq 400$
	m_π (GeV)	0.3361(22)	0.3993(25)	0.4594(29)	0.5153(32)
	$m_\pi L$	3.49	4.14	4.77	5.35
$32^3 \times 64, L_s = 2.73$ fm	$a\mu$	0.003	0.004	0.005	
	Stat.	$\simeq 400$	$\simeq 400$	$\simeq 400$	
	m_π (GeV)	0.2854(20)	0.3266(21)	0.3631(23)	
	$m_\pi L$	3.95	4.53	5.03	
$\beta = 1.95, a\mu_\sigma = 0.135$ et $a\mu_\delta = 0.17, a = 0.0785(7)$ fm					
$24^3 \times 48, L_s = 1.88$ fm	$a\mu$	0.0085			
	Stat.	$\simeq 400$			
	m_π (GeV)	0.4861(46)			
	$m_\pi L$	4.65			
$32^3 \times 64, L_s = 2.51$ fm	$a\mu$	0.0035	0.0055	0.0075	
	Stat.	$\simeq 400$	$\simeq 400$	$\simeq 400$	
	m_π (GeV)	0.3167(30)	0.3891(35)	0.4527(42)	
	$m_\pi L$	4.04	4.96	5.77	

TAB. 15 – Paramètres d’entrée $\beta, L, \mu, \mu_\sigma, \mu_\delta$ de nos simulations $N_f = 2 + 1 + 1$ avec la maille a et la masse du pion m_π correspondantes.

Cette valeur est plus grande que celle couramment adoptée de 45 ± 8 MeV [60] mais en accord avec une nouvelle analyse [107] qui inclut plus de données. Une meilleure compréhension de ce terme sera possible lorsque les simulations avec quark étrange dynamique seront disponibles [57]. Remarquons que le terme σ a aussi des implications sur la détection de la matière noire [44].

20 Résultats préliminaires $N_f = 2 + 1 + 1$

L’introduction des quarks s et c dans la mer élargit le champ d’application des calculs sur réseau. Dans le contexte de la physique du nucléon cela devrait permettre de clarifier le problème de son contenu étrange. Dans cette section nous discutons les résultats préliminaires et très parcellaires des simulations $N_f = 2 + 1 + 1$ pour la masse du nucléon. Ils seront plus complets à l’automne 2009.

Le tableau 15 résume les paramètres des simulations effectuées jusqu’à présent, c’est-à-dire $\beta=1.9$ et $\beta=1.95$. Rappelons que pour les simulations $N_f = 2 + 1 + 1$ nous avons utilisé l’action d’Iwasaki, ce qui explique pourquoi les valeurs de β sont très différentes du cas $N_f = 2$. Par contre, les valeurs de la maille sont comparables, tout comme les volumes et le domaine de masse de pion.

Le tableau 16 récapitule les résultats actuels pour la masse du nucléon. Nous n’avons que deux valeurs de β et de plus elles correspondent à des valeurs très voisines de la maille ($a = 0.0785$ fm et $a = 0.0853$ fm) ce qui empêche d’étudier la limite du continu. Les effets de volume fini sont comparables à ceux observés dans le cas $N_f = 2$.

Sur la figure 46, nous comparons les données brutes des simulations $N_f = 2, \beta = 3.9$

$a\mu$	Stat.	am_N	r_0/a
$24^3 \times 48, \beta = 1.90, a\mu_\sigma = 0.15 \text{ et } a\mu_\delta = 0.19$			
0.0040	$\simeq 400$	0.540(6)	5.178(44)
0.0060	$\simeq 400$	0.569(7)	5.209(58)
0.0080	$\simeq 400$	0.592(7)	4.989(40)
0.0100	$\simeq 400$	0.623(6)	4.864(21)
$32^3 \times 64, \beta = 1.90, a\mu_\sigma = 0.15 \text{ et } a\mu_\delta = 0.19$			
0.0030	$\simeq 400$	0.516(7)	5.217(30)
0.0040	$\simeq 400$	0.526(4)	5.179(49)
0.0050	$\simeq 400$		5.081(45)
$32^3 \times 64, \beta = 1.95, a\mu_\sigma = 0.135 \text{ et } a\mu_\delta = 0.17$			
0.0035	$\simeq 400$	0.464(5)	5.616(31)
0.0055	$\simeq 400$	0.509(4)	5.662(33)
0.0075	$\simeq 400$		5.566(44)
$24^3 \times 48, \beta = 1.95, a\mu_\sigma = 0.135 \text{ et } a\mu_\delta = 0.17$			
0.0085	$\simeq 400$	0.558(3)	5.493(41)

TAB. 16 – Masse du nucléon mesurée sur les ensembles $N_f = 2 + 1 + 1$.

et $N_f = 2 + 1 + 1$, $\beta = 1.9$ pour am_N en fonction de $a\mu$. Comme les valeurs de a sont égales à 2 % près, cette comparaison a un sens. La variation en fonction de m_π est clairement la même mais on observe un décalage vers le haut d'environ 60 MeV pour $N_f = 2 + 1 + 1$. Ce décalage peut indiquer que la valeur de a pour $N_f = 2 + 1 + 1$ et $\beta = 1.9$ est mal déterminée. Cela peut aussi être une manifestation du contenu étrange du nucléon. Une étude plus approfondie est nécessaire avant de pouvoir conclure.

Les données à $\beta = 1.95$ ne peuvent pas être comparées directement car il n'existe pas de maille similaire dans le cas $N_f = 2$. Néanmoins on peut essayer de tirer parti de ces données en supposant que la maille est assez petite pour pouvoir les comparer avec celles de $N_f = 2$ extrapolées à la limite du continu. Ceci est qualitativement justifié par l'étude de la sous-sous-section 19.2. La valeur de r_0/a extrapolé à la limite chirale en utilisant le tableau 16 est 5.68(5). Les résultats non corrigés de volume fini sont montrés sur la figure 47 ainsi que le fit chirale à l'ordre m_π^3 . A la différence du cas $\beta = 1.9$, ces données préliminaires semblent compatibles avec les résultats $N_f = 2$ bien que le fit chirale soit assez différent. Par exemple, il impliquerait un terme σ plus grand de 8%. Il est clairement impératif de compléter les données tant pour les valeurs de m_π , que pour les valeurs de β afin de mieux contrôler l'extrapolation chirale et la limite du continu. Malheureusement, les simulations pour $\beta=2.0$ et 2.1 sont encore dans la phase d'ajustement des paramètres.

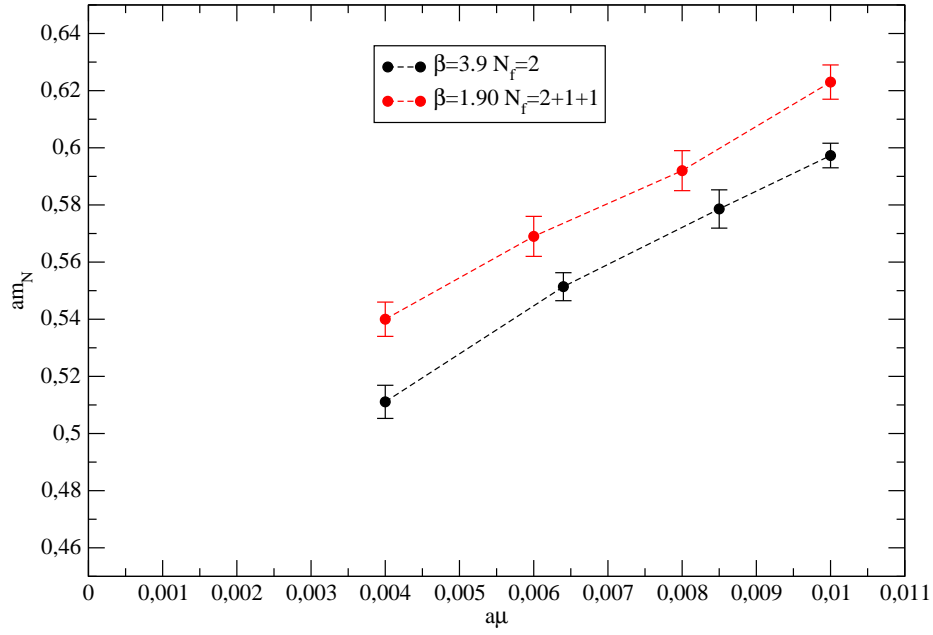


FIG. 46 – Comparaison entre $\beta = 3.9$, $N_f = 2$ et $\beta = 1.9$, $N_f = 2 + 1 + 1$ pour la masse du nucléon. Les lignes en pointillés ne sont là que pour guider l'oeil. Elles ne correspondent à aucun fit.

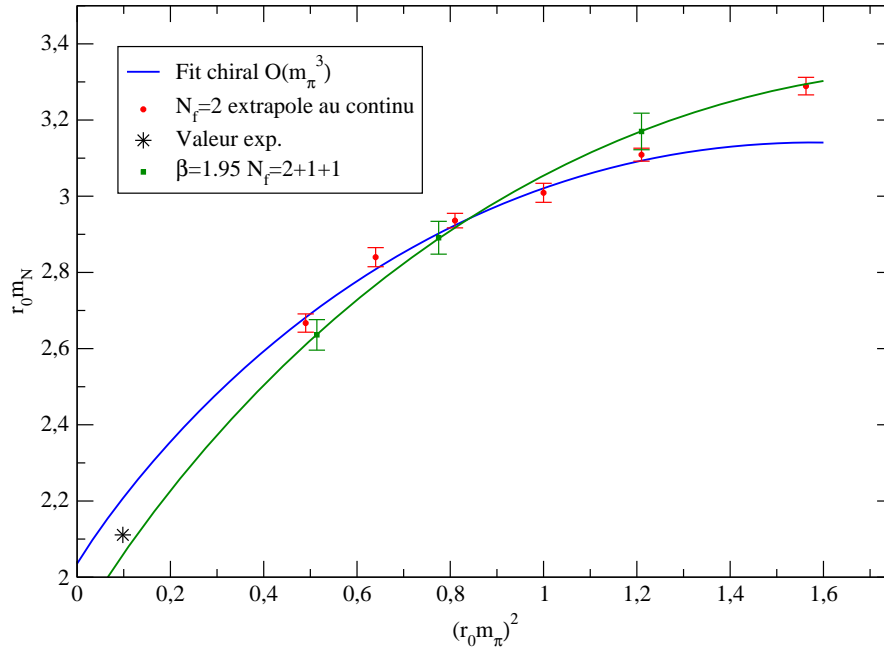


FIG. 47 – Comparaison entre les données $N_f = 2$ extrapolées à la limite du continu et les données $N_f = 2 + 1 + 1$ pour $\beta = 1.95$.

Huitième partie

Fonctions à 3 points

Sommaire

21 Facteurs de forme et distributions de partons généralisées	106
21.1 Facteurs de forme	106
21.2 Distributions de partons généralisées	107
22 Calcul des corrélateurs	110
23 Extraction du signal	113
24 Opérateurs et constantes de renormalisation	114
25 Résultats	116
25.1 Facteurs de forme isovectoriels	116
25.2 $\langle x \rangle_{u-d}$ et $\langle x \rangle_{\Delta u - \Delta d}$	121

Les facteurs de forme et les distributions de partons sont calculés à partir des fonctions à 3 points. Les opérateurs de source et puits qui créent et détruisent le nucléon ont été discutés dans le chapitre précédent. La nouvelle difficulté est ici l'évaluation des propagateurs de quarks généralisés. Cela implique de nouvelles inversions et le choix de l'opérateur de vertex conditionne la façon dont doivent être menés les calculs. Un problème supplémentaire est la présence de contributions déconnectées, qui ne sont reliées aux quarks de valence que par les gluons. Ces contributions sont coûteuses à calculer car elles impliquent d'inverser l'opérateur de Dirac d'un point quelconque du réseau vers n'importe quel autre point. Ce calcul des propagateurs "all-to-all" a été évité dans ce travail en se concentrant sur les observables isovectorielles pour lesquelles les diagrammes déconnectés ne contribuent pas, au moins dans la limite où la brisure de symétrie de saveur due aux masses twistées est négligeable.

21 Facteurs de forme et distributions de partons généralisées

Le but du calcul est d'évaluer des éléments de matrice de la forme $\langle N(p_f, s_f) | \mathcal{O} | N(p_i, s_i) \rangle$ où $|N(p, s)\rangle$ est l'état fondamental du nucléon avec impulsion p et projection de spin s , et \mathcal{O} est un opérateur qui dépend de la physique considérée.

21.1 Facteurs de forme

Si on choisit pour \mathcal{O} le courant électromagnétique, l'élément de matrice définit les facteurs de forme électromagnétiques du nucléon. Si on se restreint aux quarks u et d (simulations $N_f = 2$), le courant :

$$V_\mu = \frac{2}{3} \bar{u} \gamma_\mu u - \frac{1}{3} \bar{d} \gamma_\mu d$$

a pour décomposition :

$$\langle N(p_f, s_f) | V_\mu(0) | N(p_i, s_i) \rangle = \bar{u}(p_f, s_f) \left[\gamma_\mu F_1(Q^2) + \frac{i \sigma_{\mu\nu} Q_\nu}{2m} F_2(Q^2) \right] u(p_i, s_i) \quad (49)$$

et pour le courant axial :

$$A_\mu = \bar{u} \gamma_\mu \gamma_5 u - \bar{d} \gamma_\mu \gamma_5 d$$

on a :

$$\langle N(p_f, s_f) | A_\mu(0) | N(p_i, s_i) \rangle = \bar{u}(p_f, s_f) \left[\gamma_5 \gamma_\mu G_A(Q^2) + \frac{Q_\mu \gamma_5}{2m} G_P(Q^2) \right] u(p_i, s_i), \quad (50)$$

où $Q = p_f - p_i$, $\sigma_{\mu\nu} = i[\gamma_\mu, \gamma_\nu]/2$, m est la masse du proton et $u(p, s)$ est un spineur ¹ solution de l'équation de Dirac libre.

Au lieu d'écrire la décomposition selon les facteurs de forme de Dirac et Pauli F_1 et F_2 , on peut utiliser les facteurs de forme électromagnétiques de Sachs définis par

$$G_E = F_1(Q^2) - \frac{Q^2}{4m^2} F_2(Q^2), \quad G_M = F_1(Q^2) + F_2(Q^2). \quad (51)$$

¹A ne pas confondre avec le champ de quark u .

et qui apparaissent naturellement dans les sections efficaces de diffusion électron sur nucléon. Dans la limite statique ($m \rightarrow \infty$), G_E et G_M peuvent être interprétés respectivement comme les transformées de Fourier des distributions de charge et de magnétisation dans le nucléon. Notons que les définitions (49) et (50) supposent que les états et les spineurs sont normalisés suivant :

$$\langle \vec{p} | \vec{p}' \rangle = (2\pi)^3 2E_p \delta(\vec{p} - \vec{p}'), \quad \bar{u}(p)u(p) = 2m$$

Les facteurs de forme électromagnétiques du nucléon (proton, neutron) sont bien connus et peuvent être représentés sous la forme [56]

$$G_E^p \simeq \frac{G_M^p}{\mu^p} \simeq \frac{G_M^n}{\mu^n} \simeq \frac{1}{(1 + \frac{Q^2}{M_V^2})^2} \quad (52)$$

avec $M_V \simeq 0.84$ GeV, $\mu^p = 2.79\mu_N$, $\mu^n = -1.91\mu_N$, $\mu_N = e/(2m)$ et par

$$G_E^n \simeq \frac{A\tau}{1 + B\tau} \frac{1}{(1 + \frac{Q^2}{M_V^2})^2} \quad (53)$$

où $\tau = \frac{Q^2}{4m^2}$, $A = 1.7$ et $B = 3.3$.

Pour les facteurs de forme axial et pseudoscalaire, la situation expérimentale est moins satisfaisante. La référence [13] présente une revue récente. Le facteur de forme axial peut être paramétrisé sous la forme

$$G_A(Q^2) = \frac{G_A(0)}{(1 + \frac{Q^2}{M_A^2})^2}, \quad G_A(0) = 1.2695(29) \quad (54)$$

et la diffusion de neutrino donne $M_A \simeq 1.03$ tandis que l'électroproduction de pion au seuil donne $M_A \simeq 1.07$. Le facteur de forme pseudoscalaire $G_P(Q^2)$ n'est mesurable qu'en électroproduction de pion ² et il n'existe qu'une seule expérience [30] qui a mesuré cette quantité. Le résultat est compatible avec la dominance du pôle de pion :

$$G_P^{\text{pion pole}}(Q^2) = \frac{4m^2 G_A(Q^2)}{Q^2 + m_\pi^2}$$

21.2 Distributions de partons généralisées

Une autre catégorie d'observables apparaît lorsque l'opérateur \mathcal{O} est de la forme $\bar{q}(x)\Gamma q(0)$ avec x le long du cône de lumière : $x^2 = 0$. Ses éléments de matrice peuvent être mesurés en diffusion profondément inélastique (DIS) de leptons, ce sont les distributions de partons, et dans des processus exclusifs comme la diffusion Compton très virtuelle (DVCS), ce sont les distributions de partons généralisés (GPDs). L'intérêt pour ces dernières a été déclenché par la règle de somme de Ji [77] qui relie le premier moment des GPDs au moment angulaire total porté par les quarks. Un grand effort expérimental s'est alors mis en route à HERMES, HERA, JLab et COMPASS pour déterminer les GPDs. Une revue exhaustive de la phénoménologie de ces quantités peut être trouvée dans la référence [38].

²On peut aussi le mesurer en capture de muon mais seulement à un transfert $Q^2 \simeq m_\mu^2 \simeq 0.01 \text{ GeV}^2$.

Les GPDs $H, E, \tilde{H}, \tilde{E}$ sont définies, pour chaque saveur de quark q , par

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \int \frac{dz^-}{2\pi} e^{ixP^+z^-} \langle N(p_f, s_f) | \bar{q}(-z/2) \gamma^+ q(z/2) | N(p_i, s_i) \rangle |_{z^+=0, \vec{z}_\perp=0} = \\ \frac{1}{2P^+} \bar{u}(p_f, s_f) \left[H^q(x, \xi, t) \gamma^+ + E^q(x, \xi, t) \frac{i\sigma^{\perp\mu} \Delta_\mu}{2m} \right] u(p_i, s_i) \end{aligned} \quad (55)$$

et

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \int \frac{dz^-}{2\pi} e^{ixP^+z^-} \langle N(p_f, s_f) | \bar{q}(-z/2) \gamma_5 \gamma^+ q(z/2) | N(p_i, s_i) \rangle |_{z^+=0, \vec{z}_\perp=0} = \\ \frac{1}{2P^+} \bar{u}(p_f, s_f) \left[\tilde{H}^q(x, \xi, t) \gamma_5 \gamma^+ + \gamma_5 \tilde{E}^q(x, \xi, t) \frac{i\Delta^+}{2m} \right] u(p_i, s_i) \end{aligned} \quad (56)$$

Elles sont fonction de trois variables : la fraction d'impulsion du parton actif x , le transfert $t = \Delta^2 = (p_f - p_i)^2$ et le transfert longitudinal $\xi = \Delta^+/(2P^+)$ où $P = (p_f + p_i)/2$. Les coordonnées du cône de lumière z^\pm et \vec{z}_\perp sont définies par

$$z^\pm = \frac{z^0 \pm z^3}{\sqrt{2}}, \quad \vec{z}_\perp = (z^1, z^2)$$

Dans la limite $p_f = p_i$ on retrouve la définition des distributions de partons ordinaires $q(x)$ et $\Delta q(x)$:

$$H^q(x, 0, 0) = q(x) \quad \tilde{H}^q(x, 0, 0) = \Delta q(x)$$

et le premier moment des GPDs est relié aux facteurs de forme élastiques

$$\int_{-1}^1 dx H^q(x, \xi, t) = F_1^q(t) \quad (57)$$

$$\int_{-1}^1 dx E^q(x, \xi, t) = F_2^q(t) \quad (58)$$

$$\int_{-1}^1 dx \tilde{H}^q(x, \xi, t) = G_A^q(t) \quad (59)$$

$$\int_{-1}^1 dx \tilde{E}^q(x, \xi, t) = G_P^q(t) \quad (60)$$

où F_1^q, F_2^q, G_A^q et G_P^q désignent la contribution du quark q aux facteurs de forme.

Les GPDs dépendent d'une variable supplémentaire qui est l'échelle d'énergie μ à laquelle le théorème de factorisation est appliqué. En effet, les GPDs ne sont pas de véritables observables puisque leur détermination repose sur l'analyse en terme de QCD perturbative de l'amplitude physique³. Ceci est illustré sur la figure 48. Dans les conditions de Bjorken ($Q^2 \rightarrow \infty, Q^2/s$ fixé) l'amplitude du processus est la convolution d'un facteur dur calculable en QCD perturbative et d'un facteur mou qui définit les GPDs. On doit supposer que $\mu \gg \Lambda_{QCD}$ afin que la théorie des perturbations soit applicable.

La factorisation montrée sur la figure correspond au terme dominant dans un développement en $1/Q^2$ car le nombre de partons échangés entre les deux facteurs est

³Dans l'extraction des facteurs de forme on a une situation analogue mais c'est QED qui intervient dans l'analyse perturbative.

minimal. Dans le langage du développement en produit d'opérateurs de Wilson c'est la restriction au twist deux des opérateurs qui définissent les GPDs. La factorisation implique nécessairement une échelle qui sépare les virtualités des partons entre les facteurs dur et mou. Pour le facteur dur, elle joue le rôle de cutoff infrarouge et pour le facteur mou, elle joue le rôle de cutoff ultraviolet. L'amplitude totale est indépendante de cette échelle et comme on connaît perturbativement la dépendance en μ du facteur dur, celle du facteur mou s'en déduit. Tout calcul non perturbatif des GPDs doit être consistant avec cette évolution.

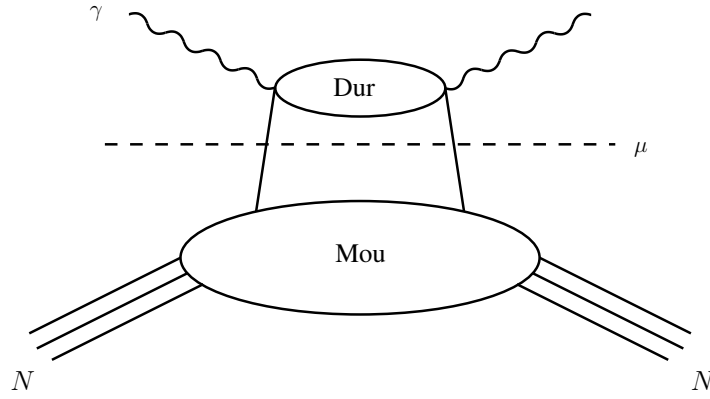


FIG. 48 – Exemple de factorisation d'un processus entre une partie dure et une partie molle.

Sur le réseau, il n'est pas possible de calculer directement les GPDs puisque celles-ci impliquent une séparation du genre lumière entre le quark initial et final ($z^+ = 0$ et $\vec{z}_\perp = 0$). Dans l'espace euclidien ceci devient $z = 0$. Pour contourner le problème on développe les opérateurs bilocaux qui apparaissent dans les équations (55) et (56) en puissances de z ce qui permet d'exprimer les GPDs en fonction des opérateurs locaux définis par [38]

$$O_q^{\mu_1 \dots \mu_n}(x) = i^{n-1} \bar{q}(x) \overleftrightarrow{D}^{(\mu_1 \dots \mu_{n-1}} \overleftrightarrow{D}^{\mu_n)} \gamma^{\mu_n} q(x) \quad (61)$$

$$\tilde{O}_q^{\mu_1 \dots \mu_n}(x) = i^{n-1} \bar{q}(x) \gamma_5 \overleftrightarrow{D}^{(\mu_1 \dots \mu_{n-1}} \overleftrightarrow{D}^{\mu_n)} \gamma^{\mu_n} q(x) \quad (62)$$

où $\overleftrightarrow{D} = (\vec{D} - \overleftarrow{D})/2$ et D est la dérivée covariante. Les parenthèses en exposant signifient que l'on symétrise par rapport aux indices μ_i et que l'on retranche la trace. Les calculs sur réseau des fonctions à trois points permettent d'évaluer les éléments de matrice de ces opérateurs. Ces derniers sont reliés aux moments des GPDs. En effet si on introduit

la décomposition en facteurs de forme généralisés

$$\begin{aligned}
\langle N(p_f, s_f) | O_q^{\mu_1 \dots \mu_n} | N(p_i, s_i) \rangle = \\
\bar{u}(p_f, s_f) \left[\sum_{\substack{i=0 \\ i \text{ pair}}} A_{ni}^q(t) \gamma^{(\mu_1} \Delta^{\mu_2} \dots \Delta^{\mu_{i+1}} P^{\mu_{i+2}} \dots P^{\mu_n}) \right. \\
+ \sum_{\substack{i=0 \\ i \text{ pair}}} B_{ni}^q(t) \frac{i \sigma^{(\mu_1 \alpha} \Delta_{\alpha} \Delta^{\mu_2} \dots \Delta^{\mu_{i+1}} P^{\mu_{i+2}} \dots P^{\mu_n})}{2m} \\
\left. + \delta_{pair}^n \frac{C_n^q(t)}{m} \Delta^{(\mu_1} \dots \Delta^{\mu_n)} \right] u(p_i, s_i) \quad (63)
\end{aligned}$$

et

$$\begin{aligned}
\langle N(p_f, s_f) | \tilde{O}_q^{\mu_1 \dots \mu_n} | N(p_i, s_i) \rangle = \\
\bar{u}(p_f, s_f) \left[\gamma_5 \sum_{\substack{i=0 \\ i \text{ pair}}} \tilde{A}_{ni}^q(t) \gamma^{(\mu_1} \Delta^{\mu_2} \dots \Delta^{\mu_{i+1}} P^{\mu_{i+2}} \dots P^{\mu_n}) \right. \\
\left. + \gamma_5 \sum_{\substack{i=0 \\ i \text{ pair}}} \tilde{B}_{ni}^q(t) \frac{\Delta^{(\mu_1}}{2m} \Delta^{\mu_2} \dots \Delta^{\mu_{i+1}} P^{\mu_{i+2}} \dots P^{\mu_n)} \right] u(p_i, s_i) \quad (64)
\end{aligned}$$

on démontre facilement les relations

$$\int_{-1}^1 dx x^{n-1} H^q(x, \xi, t) = \sum_{\substack{i=0 \\ i \text{ pair}}} A_{ni}^q(t) (-2\xi)^i + \delta_{pair}^n C_n^q(t) (-2\xi)^n \quad (65)$$

$$\int_{-1}^1 dx x^{n-1} E^q(x, \xi, t) = \sum_{\substack{i=0 \\ i \text{ pair}}} B_{ni}^q(t) (-2\xi)^i - \delta_{pair}^n C_n^q(t) (-2\xi)^n \quad (66)$$

$$\int_{-1}^1 dx x^{n-1} \tilde{H}^q(x, \xi, t) = \sum_{\substack{i=0 \\ i \text{ pair}}} \tilde{A}_{ni}^q(t) (-2\xi)^i \quad (67)$$

$$\int_{-1}^1 dx x^{n-1} \tilde{E}^q(x, \xi, t) = \sum_{\substack{i=0 \\ i \text{ pair}}}^{n-1} \tilde{B}_{ni}^q(t) (-2\xi)^i \quad (68)$$

22 Calcul des corrélateurs

Pour calculer les fonctions à trois points introduites dans la section précédente on a besoin d'évaluer un corrélateur de la forme

$$C_3(x, y, z) = \langle J(x) \mathcal{O}(y) \bar{J}(z) \rangle$$

et en utilisant l'invariance par translation on fixe $z = 0$, ce qui sera implicite dans la suite.

Si on introduit un indice global $g \equiv (A, \alpha, a)$ (A représente la saveur, a la couleur et α l'indice de Dirac) comme on l'a vu lors de la section 17, le champ interpolant peut s'écrire sous la forme

$$J(x) = \Lambda_{g_1 g_2 g_3} \chi_{g_1}(x) \chi_{g_2}(x) \chi_{g_3}(x)$$

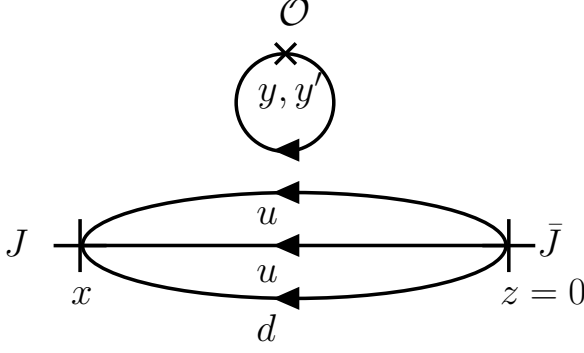


FIG. 49 – Fonction à 3 points avec une contribution déconnectée.

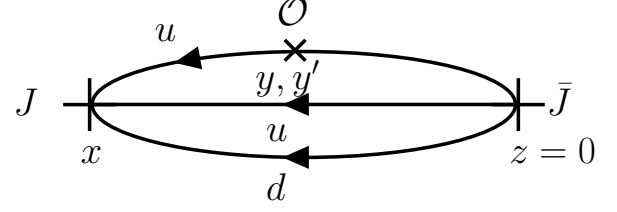


FIG. 50 – Fonction à 3 points sans contribution déconnectée.

où les champs χ sont les champs de quarks dans la base twistée. Nous utilisons comme dans le cas des fonctions à 2 points des champs de quarks avec smearing. L'opérateur \mathcal{O} peut aussi s'écrire sous la forme générique

$$\mathcal{O}(y) = \mathcal{O}(y, y') = \bar{\chi}_{j_1}(y) \Gamma_{j_1 j_2} \chi_{j_2}(y')$$

La présence d'un nouvel indice y' est dû au fait que sur réseau la dérivée covariante utilise un point et son plus proche voisin. La matrice Γ peut dépendre des liens de jauge à travers les dérivées covariantes.

L'évaluation du corrélateur à l'aide de l'intégrale de chemin donne

$$\langle J(x) \mathcal{O}(y) \bar{J}(z) \rangle = \frac{1}{Z} \int [dU] \det \mathcal{D}(U) e^{-S_g} \left[(-1)^\epsilon \Lambda_{g_1 g_2 g_3} \bar{\Lambda}_{g'_1 g'_2 g'_3} \Gamma_{j_1 j_2} S_{g_1 j_1}^U(x, y) S_{g_2 g'_2}^U(x, z) S_{g_3 g'_3}^U(x, z) S_{j_2 g'_1}^U(y', z) + \text{permutations} \right] \quad (69)$$

où ϵ est la parité de la permutation des champs de fermions.

Dans l'expression précédente deux choses doivent être notées :

- La première est qu'une des permutations possibles contient un propagateur entre y et y' , qui n'est relié aux quarks de valence que par les gluons. Cette contribution dite déconnectée est montrée sur la figure 49. L'évaluation de cette contribution étant coûteuse, nous nous limitons aux calculs des combinaisons isovectorielles dans lesquelles, aux effets de brisure d'isospin près, les diagrammes déconnectés se compensent. Nous n'avons donc évalué que les parties connectées dont un exemple est montrée sur la figure 50.
- La deuxième remarque tient au fait que le calcul du corrélateur nécessite de connaître un propagateur entre le point x et le point y . Or ce propagateur n'est pas connu car lors de l'évaluation des fonctions à 2 points seul le propagateur entre $z = 0$ et n'importe quel autre point du réseau a été calculé.

Pour organiser le calcul, on remarque que l'équation (69) peut s'écrire :

$$\langle J(x) \mathcal{O}(y) \bar{J}(z) \rangle = \frac{1}{Z} \int [dU] \det \mathcal{D}(U) e^{-S_g} B_{j_1 g'_1}(x, y, z) \Gamma_{j_1 j_2} S_{j_2 g'_1}^U(y', z)$$

où on a défini le *propagateur généralisé* B ⁴ (voir figure 51) par

$$B_{j_1 g'_1}(x, y, z) = (-1)^\epsilon \Lambda_{g_1 g_2 g_3} \bar{\Lambda}_{g'_1 g'_2 g'_3} S_{g_1 j_1}^U(x, y) S_{g_2 g'_2}^U(x, z) S_{g_3 g'_3}^U(x, z) + \text{permutations}$$

⁴B pour backward

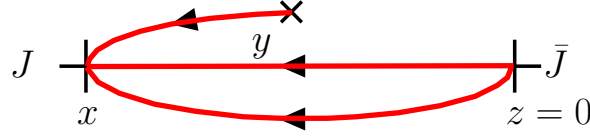


FIG. 51 – Diagramme d'un propagateur généralisé (partie rouge). La partie manquante pour fermer le diagramme entre y et $z = 0$ est un propagateur “normal” déjà calculé lors de l'évaluation des fonctions à 2 points.

qui est solution de l'équation

$$\sum_{y,j_1} \mathcal{D}_{g_1 j_1}^U(x, y) B_{j_1 g'_1}(x, y, z) = \Sigma_{g_1 g'_1}(x, z) \quad (70)$$

avec la source généralisée

$$\Sigma_{g_1 g'_1}(x, z) = (-1)^\epsilon \Lambda_{g_1 g_2 g_3} \bar{\Lambda}_{g'_1 g'_2 g'_3} S_{g_2 g'_2}^U(x, z) S_{g_3 g'_3}^U(x, z) + \text{permutations} \quad (71)$$

Dans la pratique on doit utiliser la relation

$$S_{A, \alpha\beta}^{ab}(0, x) = (\gamma_5 S^\dagger \gamma_5)_{B, \alpha\beta}^{ab}(x, 0)$$

pour permuter les indices des propagateurs.

A ce stade, on remarque que le propagateur généralisé ne dépend pas de la structure de l'opérateur \mathcal{O} , mais qu'il dépend par contre, à travers la source, de la structure des champs interpolants c'est-à-dire de Λ et $\bar{\Lambda}$. Rappelons que pour le proton, Λ et $\bar{\Lambda}$ contiennent chacun, comme vu dans la section 17, un indice de Dirac libre. Le coût calcul étant trop important, il n'est pas envisageable de résoudre l'équation (70) pour les $4 \times 4 = 16$ choix possibles. On considère donc seulement les combinaisons linéaires qui sont nécessaires pour extraire les facteurs de forme généralisés. Pour les facteurs de forme électromagnétiques et faibles, il suffit de considérer la contraction des indices de Dirac du corrélateur avec les matrices

$$\frac{1 + \gamma_0}{4}, \quad \sum_{k=1}^3 \frac{1 + \gamma_0}{4} i \gamma_5 \gamma_k$$

pour obtenir deux combinaisons linéaires indépendantes. En ce qui concerne les facteurs de forme généralisés nos résultats se limitent pour l'instant au premier moment de H et \tilde{H} dans la limite $\Delta = 0$. Comme on peut le voir sur les décompositions (63) et (64) il n'y a qu'un seul terme dans chaque cas, donc l'extraction du facteur de forme est triviale.

Les éléments de matrice considérés impliquent des états d'impulsion définie. Pour réaliser cela nous imposons que l'état final ait une impulsion nulle, ce qui revient à moyenner la source généralisée sur \vec{x} . On impose l'impulsion de l'état initial en remplaçant l'opérateur $\mathcal{O}(y)$ par sa transformée de Fourier

$$\mathcal{O}(\vec{k}) = \frac{1}{V} \sum_{\vec{x}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{x}} \mathcal{O}(x)$$

ce qui, grâce à l'invariance par translation, sélectionne la bonne impulsion dans l'état initial dont on fixe la position de la source à $z = 0$ comme indiqué précédemment.

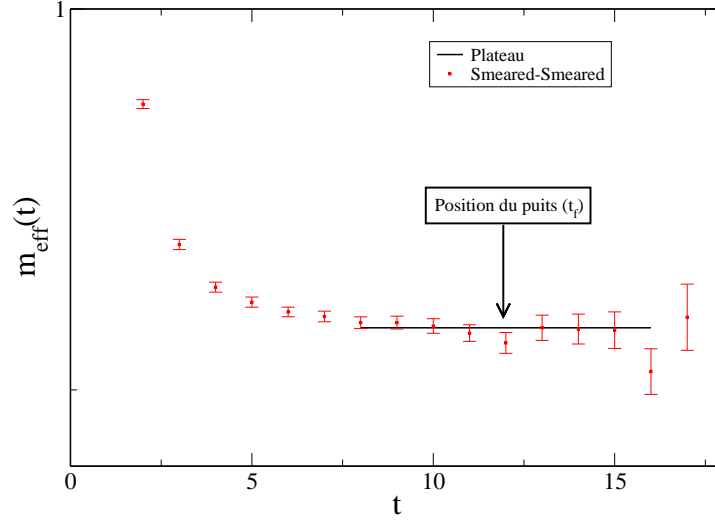


FIG. 52 – Illustration de la position du puits pour le calcul des fonctions à 3 points. Le temps du puits se situe à peu près au milieu du plateau de la masse effective. A cet endroit la contribution de l'état fondamental est celle qui domine.

23 Extraction du signal

Notons :

$$C_3(t_f, t; \vec{k}) = \sum_{\vec{x}, \vec{y}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{y}} C_3(x, y, z) |_{x^0=t_f, y^0=t, z=0}$$

Asymptotiquement pour $t_f - t \gg 1$ et $t \gg 1$, on sait que

$$C_3(t_f, t; \vec{k}) \rightarrow \langle 0 | J | N(\vec{0}) \rangle \langle N(\vec{0}) | \mathcal{O} | N(\vec{k}) \rangle \langle N(\vec{k}) | \bar{J} | 0 \rangle e^{-E(\vec{k})(t_f-t)} e^{-E(\vec{0})t}$$

pour un réseau infini dans la direction temporelle. Le choix de t_f (le puits du hadron) est un compromis entre deux exigences :

- $t_f - t$ et t doivent être assez grands pour que le corrélateur soit dominé par la contribution du nucléon.
- Le signal, qui décroît exponentiellement avec $t_f - t$ et t , doit être suffisant grand pour être mesurable avec une précision raisonnable.

Comme illustré sur la figure 52 le compromis choisi dans nos calculs est $t_f = 12 = T/4$ de sorte que l'extension temporelle du réseau T peut être considérée comme effectivement infinie. A la différence du calcul des masses, on n'exploite pas le signal entre $T/2$ et T .

Pour extraire efficacement l'élément de matrice $\langle N(\vec{0}) | \mathcal{O} | N(\vec{k}) \rangle$, on a intérêt à compenser approximativement les dépendances temporelles et les facteurs d'overlap en utilisant les fonctions à 2 points $C_2(t, \vec{k})$. Pour cela on construit le rapport

$$R(t, \vec{k}) = \frac{C_3(t_f, t; \vec{k})}{C_2(t_f, \vec{0})} \sqrt{\frac{C_2(t_f - t, \vec{k}) C_2(t, \vec{0}) C_2(t_f, \vec{0})}{C_2(t_f - t, \vec{0}) C_2(t, \vec{k}) C_2(t_f, \vec{k})}}$$

Les dépendances temporelles et les facteurs d'overlap se compensent approximativement et $R(t, \vec{k})$ tend vers une constante quand t devient grand (tout en restant petit devant t_f !). Cette constante est l'élément de matrice recherché. Un exemple de plateau pour le facteur de forme axial à transfert nul est montré sur la figure 53.

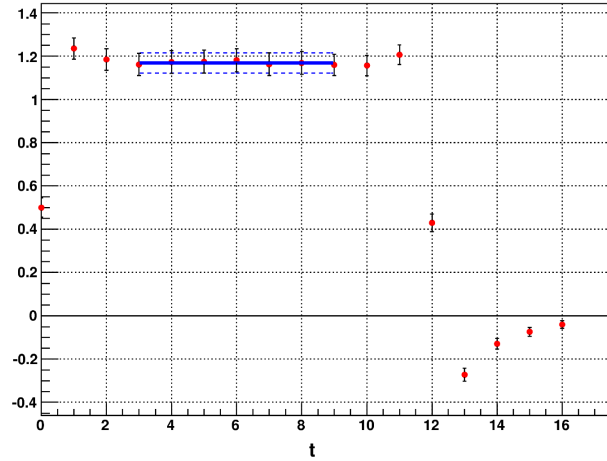


FIG. 53 – Exemple de plateau pour $G_A(0)$ en fonction de t . La statistique utilisée est de 555 configurations appartenant à l'ensemble $\beta = 3.9$, $L = 24$ et $a\mu = 0.0064$.

24 Opérateurs et constantes de renormalisation

Pour les facteurs de forme, les opérateurs que nous considérons sont les combinaisons isovectorielles $V_\mu^u - V_\mu^d$ et $A_\mu^u - A_\mu^d$ des courants

$$V_\mu^q = \bar{q}(x)\gamma_\mu q(x), \quad A_\mu^q = \bar{q}(x)\gamma_\mu\gamma_5 q(x)$$

En ce qui concerne les GPDs bien que la méthodologie et les outils soient en place, il reste un gros travail d'exécution à faire avant de pouvoir produire des résultats. Nous nous limitons donc au cas $p_f = p_i$, c'est-à-dire les distributions de partons ordinaires et de plus à leur premier moment. Les opérateurs qui interviennent sont

$$O_q^{00}(x) = \bar{q}(x) \left[\gamma_0 \vec{D}_0 - \frac{1}{3}(\gamma_1 \vec{D}_1 + \gamma_2 \vec{D}_2 + \gamma_3 \vec{D}_3) \right] q(x)$$

pour le cas non polarisé et

$$\tilde{O}_q^{i0}(x) = \bar{q}(x)\gamma_5(\gamma_i \vec{D}_0 + \gamma_0 \vec{D}_i)q(x), \quad i = 1, 2, 3$$

pour le cas polarisé. Comme dans le cas des facteurs de forme nous ne considérons que les combinaisons isovectorielles.

Pour pouvoir comparer les résultats obtenus sur réseau aux quantités physiques qui elles sont définies dans le continu, éventuellement renormalisées dans un certain schéma, il est nécessaire de renormaliser les opérateurs du réseau. Nous utilisons la méthode dite RI/MOM [90] (regularisation independent momentum subtraction scheme) qui à l'avantage d'être non perturbative et assez simple à utiliser. Le principe est de calculer sur le réseau l'élément de matrice de l'opérateur \mathcal{O} entre des états de quarks, d'impulsion p loin de la couche de masse. La prescription de renormalisation est alors d'imposer que la valeur à $p^2 = \mu^2$ où μ est l'échelle de renormalisation ⁵, soit égale à la valeur dans l'approximation en arbre de la théorie continue. L'opérateur renormalisé est

$$\mathcal{O}_R = Z_{\mathcal{O}}(\mu a, g(a))\mathcal{O}(a)$$

⁵à ne pas confondre avec la masse twistée

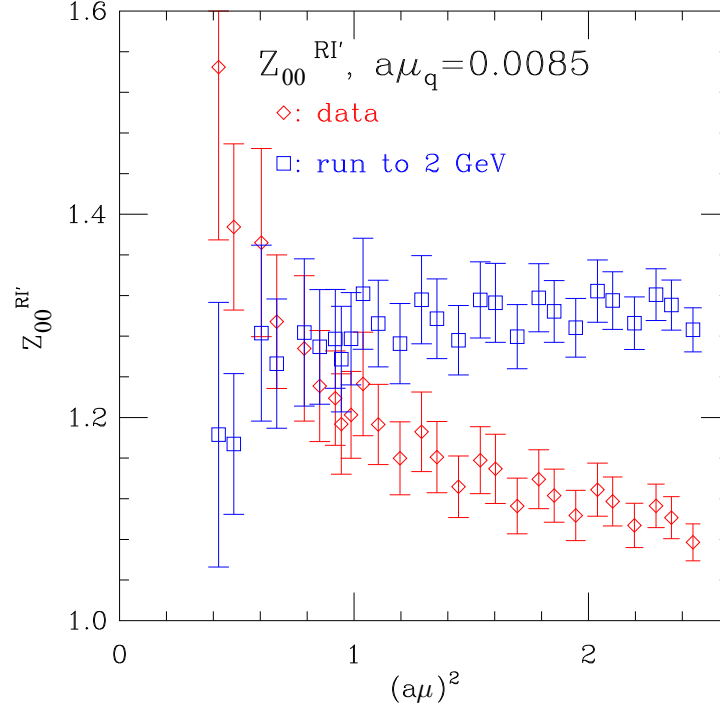


FIG. 54 – Constante de renormalisation de O^{00} pour $\beta = 3.9$, c'est-à-dire $a = 0.0855(6)$ fm en fonction de $a\mu$ qui est ici l'échelle de renormalisation.

où Z_O est la constante de renormalisation de l'opérateur calculée par cette prescription. Pour les constantes de renormalisation qui dépendent de l'échelle μ la prescription est arbitraire car si μ est suffisamment grand on peut utiliser la théorie des perturbations pour relier une prescription (schéma) à une autre. Pour celles qui sont indépendantes de μ on peut montrer [90] qu'elles coïncident avec celles obtenues par les identités de Ward. Par exemple on trouve bien que la charge du proton est égale à un.

En pratique, il est nécessaire de fixer la jauge faute de quoi l'élément de matrice serait nul puisque les états de quarks ne sont pas singlets de couleur. Les résultats que nous utilisons proviennent de calculs dans la jauge de Landau. L'échelle de renormalisation doit être suffisamment grande par rapport à Λ_{QCD} pour que les méthodes perturbatives soient applicables. Pour le tester on vérifie que la variation de Z_O avec μ suit l'évolution perturbative. C'est ce qui est montré sur la figure 54 où les points rouges représentent les données brutes pour la constante de renormalisation de l'opérateur O^{00} et les points bleus sont obtenus à partir des données brutes par l'évolution perturbative à trois boucles [61] vers une échelle de référence $\mu_0 = 2$ GeV. On observe bien un plateau pour $\mu \gtrsim 2$ GeV. Une étude plus approfondie, sur une échelle d'énergie plus large, devra prendre en compte des corrections non perturbatives en utilisant le développement en produit d'opérateurs de Wilson.

On peut alors utiliser les relations perturbatives [63] pour relier les constantes de renormalisation du schéma RI/MOM à celles du schéma \overline{MS} dans lequel sont définies les distributions de partons ou les GPDs expérimentales.

Les constantes de renormalisation Z_V , Z_A des courants isovectoriels V et A sont indépendantes d'échelle car il s'agit d'une renormalisation finie, et on peut aussi les fixer en imposant les identités de Ward. Cela conduit à des valeurs compatibles avec

β	Z_V	Z_A	$Z_{00}^{MS}(2 \text{ GeV})$	$\tilde{Z}_{00}^{MS}(2 \text{ GeV})$
3.9	0.65(3)	0.76(2)	1.20(3)	?

TAB. 17 – Constantes de renormalisation obtenues par la méthode non perturbative RI/MOM.

celles obtenues par la méthode RI/MOM. Le tableau 17 résume les valeurs que nous utilisons dans la suite. Elles sont tirées de la référence [39] pour Z_V et Z_A , et Z^{00} nous a été communiqué par Z.Liu à titre préliminaire [85].

25 Résultats

Nous présentons les résultats disponibles actuellement, c'est-à-dire correspondant à $\beta = 3.9$ ou $a = 0.0855(6)$ fm. Nous ne pouvons donc pas étudier l'extrapolation à la limite du continu. Par contre, nous disposons de deux volumes pour une des masses de quarks. Une partie des résultats pour les facteurs de forme avaient été présentés lors de la conférence Lattice 2008 [5] par Tomasz Korzec que je remercie pour m'avoir fourni les données brutes. D'autres collaborations ont aussi calculé ces quantités comme RBC et UKQCD [133] avec $N_f = 2 + 1$ saveurs de quarks domain wall dynamiques, LHPC [121] avec le même type de quarks, QCDSF et UKQCD [64] avec $N_f = 2$ saveurs de quarks Wilson clover dynamiques. Une comparaison pour les facteurs de forme électromagnétique du nucléon entre $N_f = 0$ (quenched) et $N_f = 2$ saveurs de quarks de Wilson a été effectuée dans la référence [4].

25.1 Facteurs de forme isovectoriels

Sur les figures 55, 56 et 57 on peut voir les facteurs de forme isovectoriels électrique, magnétique et axial en fonction de Q^2 et pour quatre masses de pion, ainsi que les fits phénoménologiques. La comparaison entre les volumes $L = 24$ et $L = 32$ semble indiquer que les effets de volume fini sont modérés pour cette valeur de a et de m_π , mais cette comparaison qualitative peut être trompeuse comme on le verra plus loin. En effet, les plus petites valeurs de Q^2 et aussi la densité de points à faible transfert ne sont pas les mêmes pour les deux volumes. L'évolution des facteurs de forme calculés quand la masse du pion diminue tend à rapprocher les valeurs calculées de celles de l'expérience, ce qui est attendu.

Le facteur de forme pseudoscalaire montré sur la figure 58 permet d'apprécier sous un jour différent le problème de l'extrapolation chirale puisqu'à petit Q^2 il est dominé par le pôle du pion. Il est satisfaisant d'observer la variation caractéristique en $1/(Q^2 + m_\pi^2)$ quand la masse du pion diminue. Cependant l'accord n'est que qualitatif et il faudrait disposer de calculs avec une maille plus petite pour le confirmer.

Bien que nous ne disposions que de la maille $a = 0.0855$ fm ce qui exclut l'extrapolation à la limite du continu et donc l'utilisation de la théorie de perturbation chirale continue, il est intéressant de montrer, en fonction de m_π^2 , les valeurs de M_V , M_A , $G_M(0)$ et $G_A(0)$ que nous pouvons extraire de nos données. Nous avons effectué un

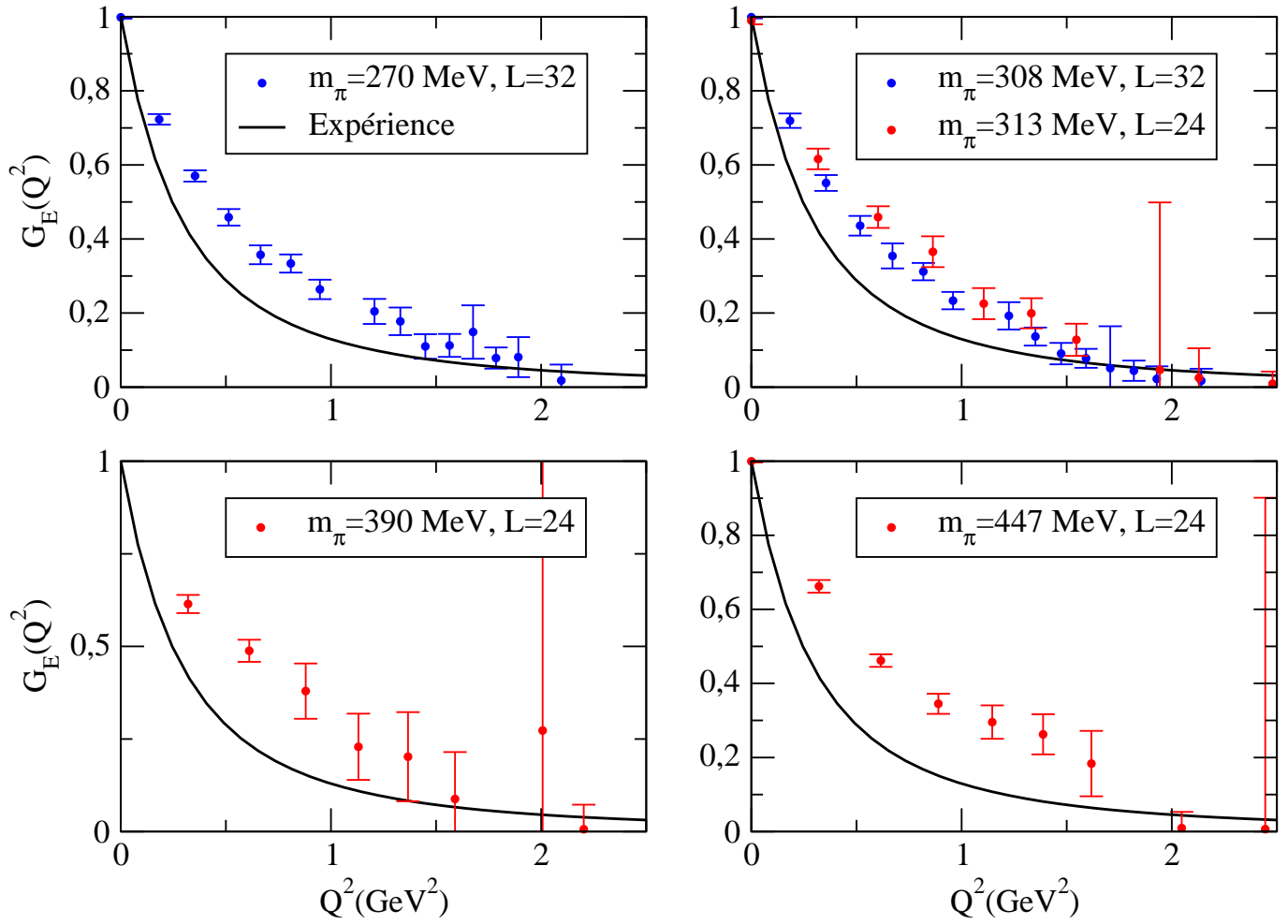


FIG. 55 – Facteur de forme électrique du nucléon pour plusieurs valeurs de m_π à $\beta = 3.9$ soit $a = 0.0855(6) \text{ fm}$.

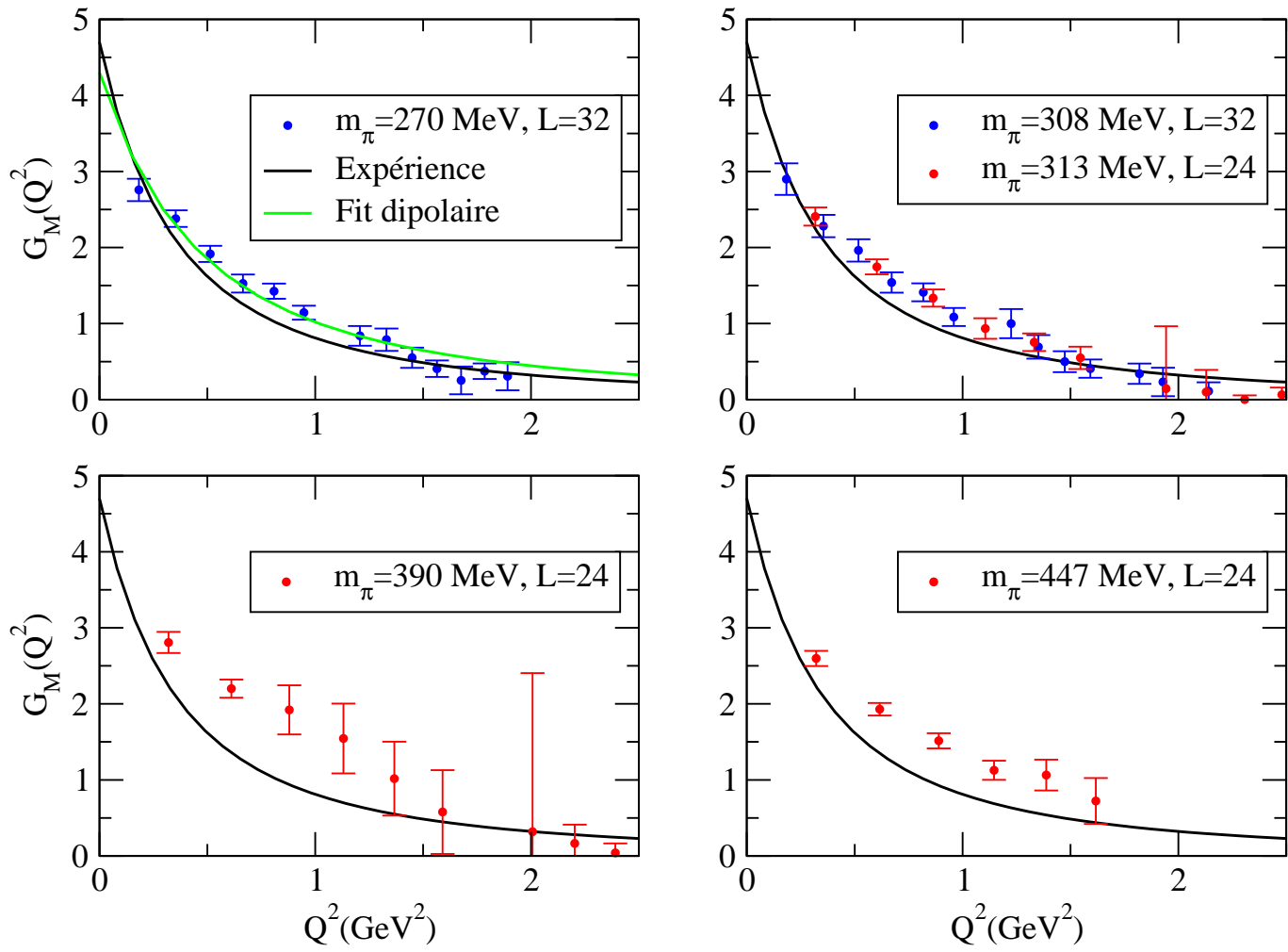


FIG. 56 – Facteur de forme magnétique du nucléon pour plusieurs valeurs de m_π à $\beta = 3.9$ soit $a = 0.0855(6)$ fm.

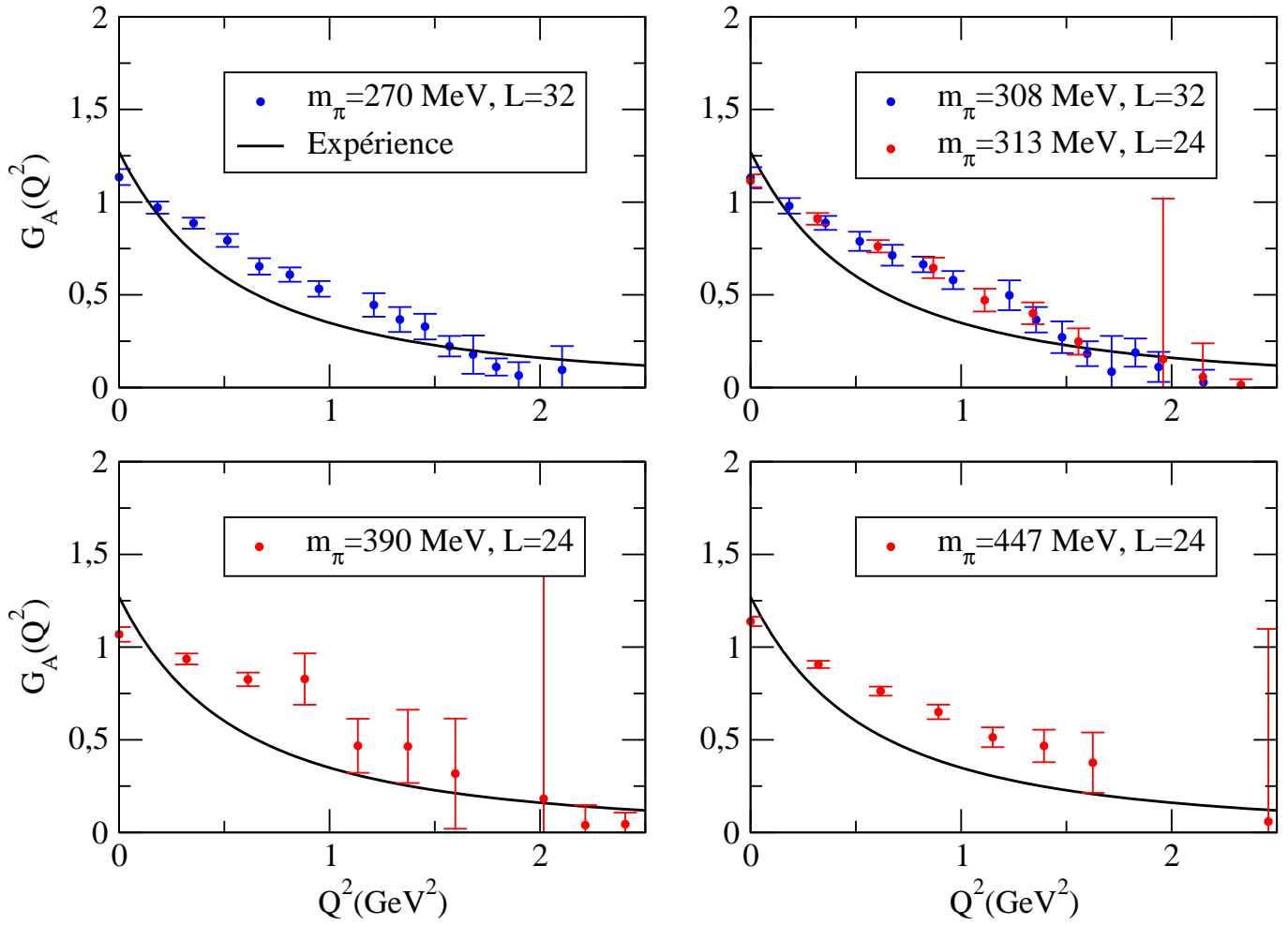


FIG. 57 – Facteur de forme axial du nucléon pour plusieurs valeurs de m_π à $\beta = 3.9$ soit $a = 0.0855(6)$ fm.

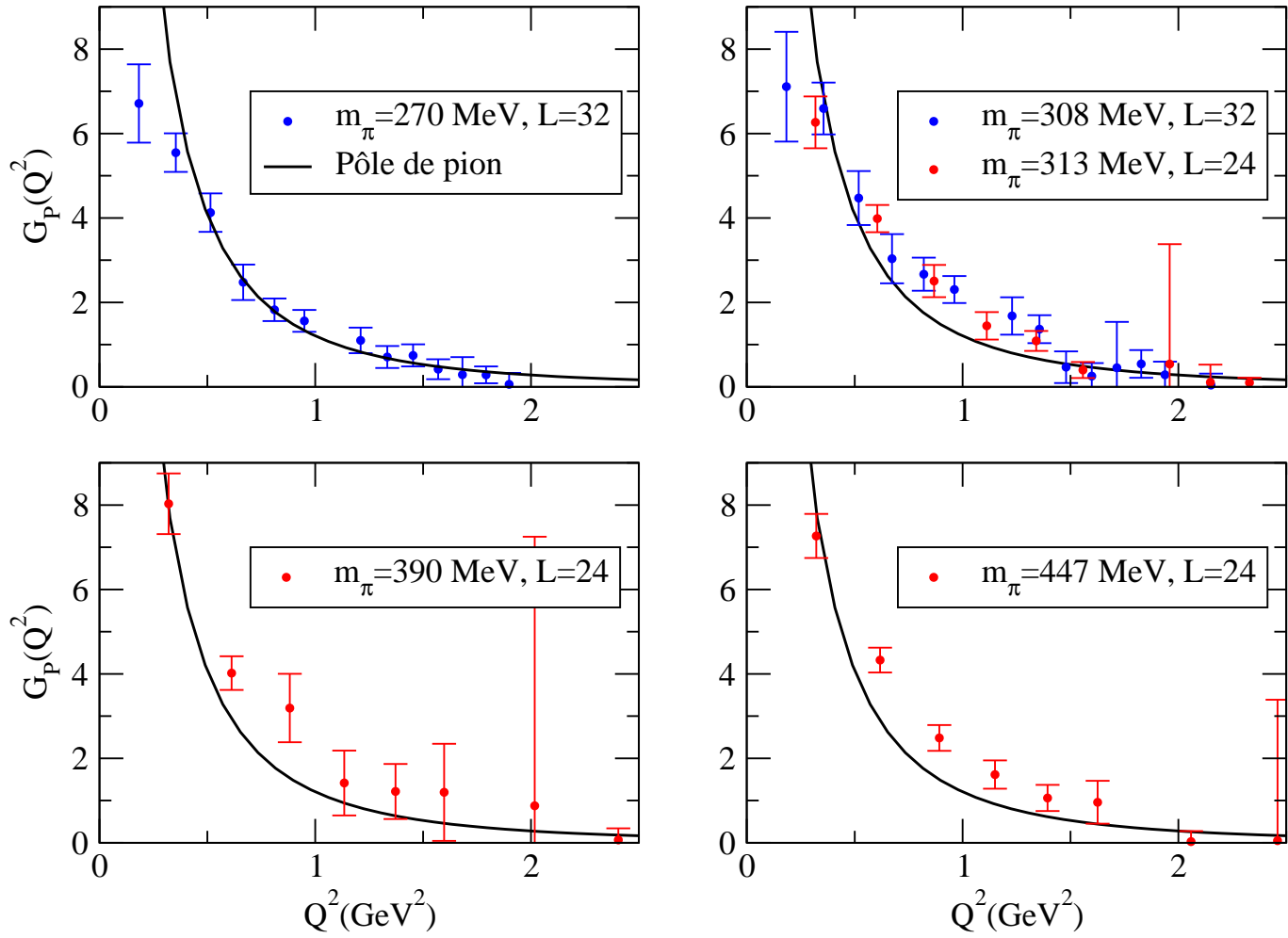


FIG. 58 – Facteur de forme pseudoscalaire du nucléon pour plusieurs valeurs de m_π à $\beta = 3.9$ soit $a = 0.0855(6)$ fm.

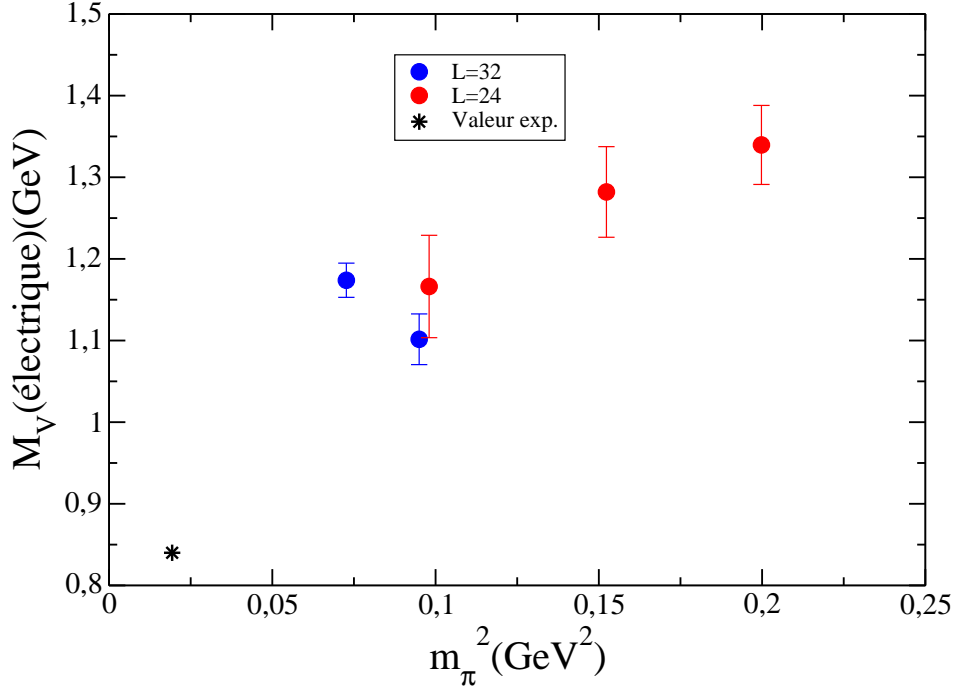


FIG. 59 – Masse M_V tirée de la combinaison isovectorielle des facteurs de forme électrique du proton et du neutron à $\beta = 3.9$ soit $a = 0.0855(6)$ fm.

fit non linéaire des expressions (52), (53), (54) et le résultat est montré sur les figures 59, 60, 61, 62 et 63. Sur toutes ces figures, l'étoile représente la valeur expérimentale. Les grandes barres d'erreur observées pour $G_M(0)$ sont en partie dues au fait que le fit contient deux paramètres. De façon générale l'accord semble satisfaisant. Pour les facteurs de forme électromagnétiques la comparaison entre les résultats pour $L = 24$ et $L = 32$ montre que les effets de volume fini ne sont pas vraiment négligeables. Tout ceci est naturellement à confirmer par une étude systématique en fonction de la maille et du volume.

25.2 $\langle x \rangle_{u-d}$ et $\langle x \rangle_{\Delta u-\Delta d}$

Les figures 64 et 65 montrent le premier moment des distributions de quarks isovectorielles non polarisées $\langle x \rangle_{u-d}$ et polarisées $\langle x \rangle_{\Delta u-\Delta d}$ en fonction de m_π^2 . Ils sont reliés aux facteurs de forme généralisés par :

$$\langle x \rangle_{u-d} = A_{20}^{u-d}(t=0), \quad \langle x \rangle_{\Delta u-\Delta d} = \tilde{A}_{20}^{u-d}(t=0)$$

comme on peut le voir sur les équations (63) et (64) appliquées au cas $p_i = p_f$. Les valeurs sont données dans le tableau 18. Comme dans le cas des facteurs de forme nous ne disposons que d'une valeur de β . L'extrapolation à la limite du continu devra attendre que les autres valeurs de la maille soient disponibles. L'extrapolation chirale (continue) n'est donc pas possible. La variation sur le domaine en m_π^2 couvert par nos simulations est très modérée, comme dans la référence [21], mais ceci n'exclut pas une variation rapide lorsque l'on se rapproche du point physique [21]. De plus ce sont les valeurs non renormalisées et le calcul des constantes de renormalisation en est encore à un stade préliminaire. La comparaison avec l'expérience est donc prématurée. A titre d'illustration, nous ap-

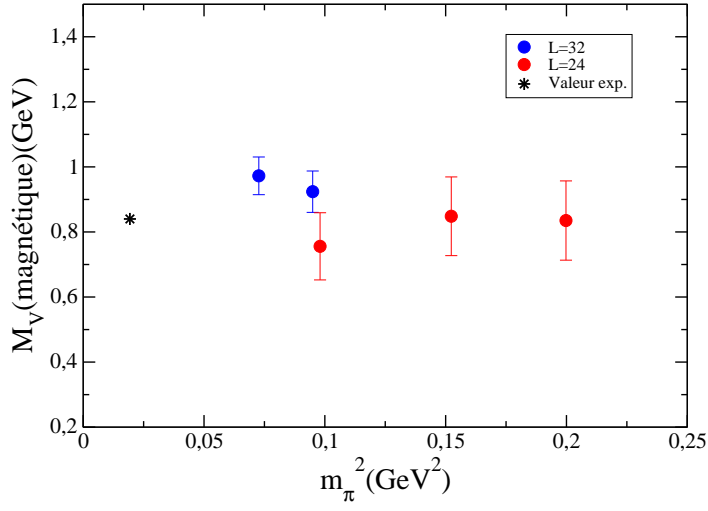


FIG. 60 – Masse M_V tirée de la combinaison isovectorielle des facteurs de forme magnétique du proton et du neutron à $\beta = 3.9$ soit $a = 0.0855(6)$ fm en fonction de m_π^2 .

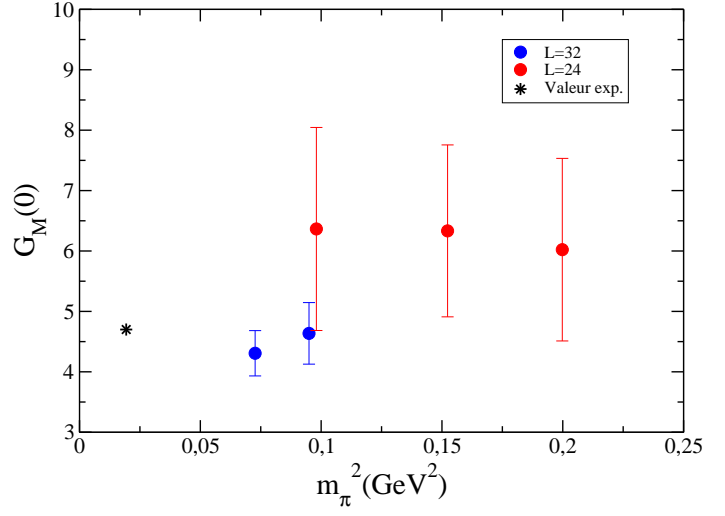


FIG. 61 – Valeur à transfert nul de la combinaison isovectorielle des facteurs de forme magnétique du proton et du neutron à $\beta = 3.9$ soit $a = 0.0855(6)$ fm en fonction de m_π^2 .

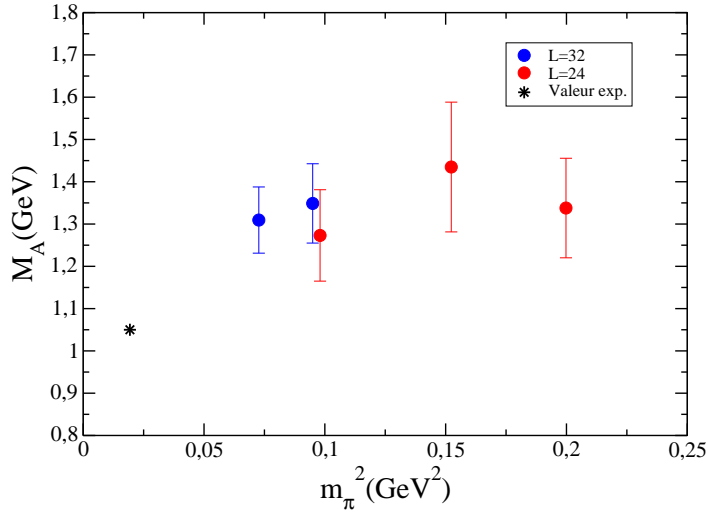


FIG. 62 – Masse M_A tirée de la combinaison isovectorielle des facteurs de forme axial du proton et du neutron à $\beta = 3.9$ soit $a = 0.0855(6)$ fm en fonction de m_π^2 . La valeur expérimentale indiquée est la moyenne de celle obtenue en diffusion de neutrino $M_A \simeq 1.03$ et celle en électroproduction de pion au seuil $M_A \simeq 1.07$.

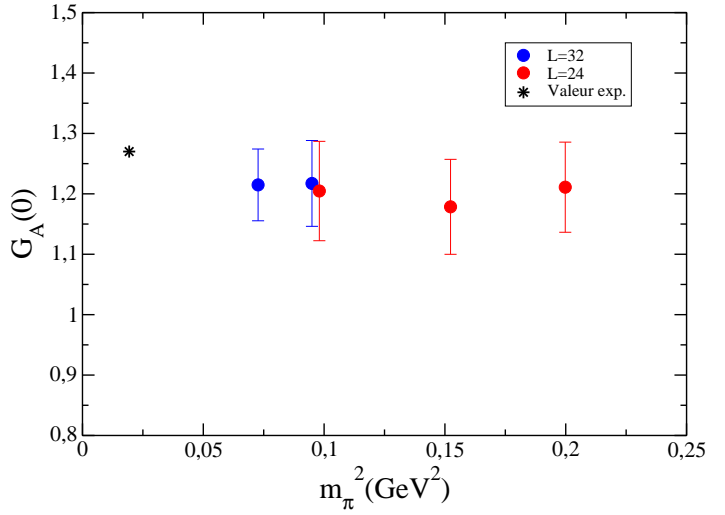


FIG. 63 – Valeur à transfert nul de la combinaison isovectorielle des facteurs de forme axial du proton et du neutron à $\beta = 3.9$ soit $a = 0.0855(6)$ fm en fonction de m_π^2 .

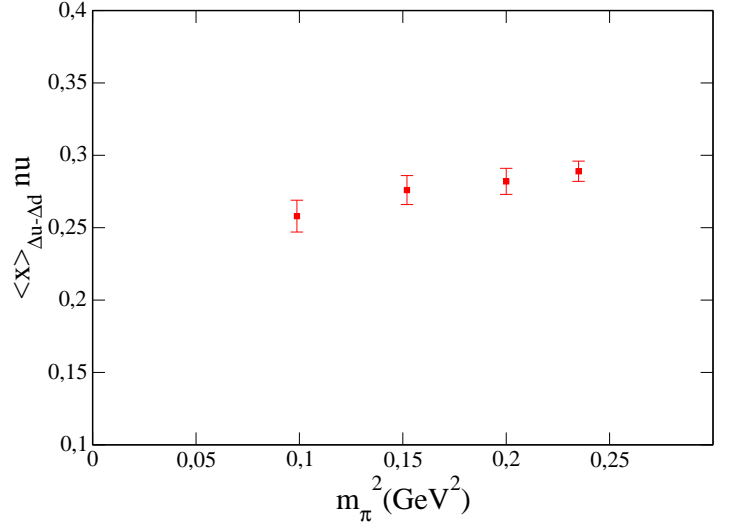
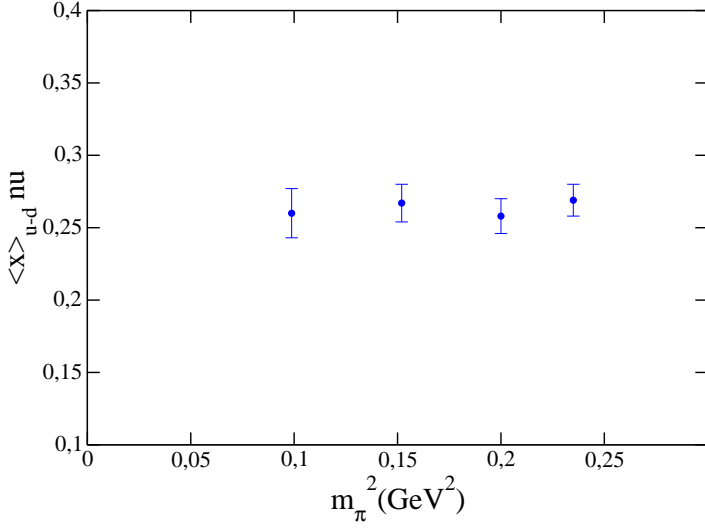


FIG. 64 – Valeurs non renormalisées de $\langle x \rangle_{u-d}$ en fonction de m_π^2 à $\beta = 3.9$ soit $a = 0.0855(6)$ fm.

FIG. 65 – Valeurs non renormalisées de $\langle x \rangle_{\Delta u-\Delta d}$ en fonction de m_π^2 à $\beta = 3.9$ soit $a = 0.0855(6)$ fm.

$a\mu$	$\langle x \rangle_{u-d} \text{ nu}$	Statistique	$\langle x \rangle_{\Delta u-\Delta d} \text{ nu}$	Statistique
0.004	0.260(17)	944	0.258(11)	944
0.0064	0.267(13)	556	0.276(10)	556
0.0085	0.258(12)	373	0.282(9)	365
0.01	0.269(11)	470	0.289(7)	470

TAB. 18 – Mesures pour $\langle x \rangle_{u-d}$ et $\langle x \rangle_{\Delta u-\Delta d}$ et statistique correspondante en fonction de $a\mu$ à $\beta = 3.9$.

pliquons le même facteur de renormalisation multiplicatif $Z_{00}^{\overline{MS}}(2 \text{ GeV}) = 1.20(3)$ estimé par Z.Liu [85] aux résultats à la plus petite masse de pion, ce qui donne

$$\langle x \rangle_{R,u-d} = 0.312(22), \quad \langle x \rangle_{R,\Delta u-\Delta d} = 0.310(15) \quad \text{schéma } \overline{MS} \text{ à } 2 \text{ GeV}$$

c'est-à-dire un facteur environ 2 par rapport aux valeurs phénoménologiques tirées de la référence [40] :

$$\langle x \rangle_{u-d} = 0.154(3), \quad \langle x \rangle_{\Delta u-\Delta d} = 0.196(9) \quad \text{schéma } \overline{MS} \text{ à } 2 \text{ GeV}$$

Cette surestimation n'est pas spécifique à nos calculs. Elle a été observée par toutes les autres collaborations LHPC [67], RBC $N_f = 2$ [84], RBC $N_f = 2 + 1$ [103], QCDSF-UKQCD [21]. Avant de développer plus en avant le calcul des GPDs il est clair qu'il faut résoudre ce problème puisque les observables $\langle x \rangle_{u-d}$ et $\langle x \rangle_{\Delta u-\Delta d}$ sont connues sans ambiguïté et avec une grande précision.

Neuvième partie

Conclusion

Dans cette thèse, nous avons présenté le principe de la discrétisation des théories de champs sur réseau en commençant par l'exemple d'un champ scalaire. Le concept d'intégrale de chemin joue un rôle central et la discrétisation sur réseau permet de lui donner un sens précis. Puis nous avons vu comment discrétiser les champs de gluons et de fermions qui interviennent dans la théorie de l'interaction forte qu'est la chromodynamique quantique. Les problèmes soulevés lors de cette étape, notamment celui des doubleurs et de la brisure de la symétrie chirale, ont été détaillés. Certaines solutions dont celles proposées par K.Wilson aux débuts des calculs sur réseau ont été décrites. Nous avons ensuite développé la formulation en masse twistée de QCD sur réseau. Les applications d'une telle formulation à la génération des configurations de jauge, aux calculs des masses des particules puis des facteurs de forme et des distributions de partons ont fait l'objet du reste de la thèse. Une partie plus spécifiquement consacrée aux aspects algorithmiques et informatiques a montré la nécessité de disposer de moyens de calcul haute performance afin de continuer à améliorer la précision des simulations actuelles.

Les avantages de la formulation en masse twistée de QCD sur réseau sont d'une part la protection contre les modes nuls de l'opérateur de Dirac, un des obstacles aux calculs avec des masses de quarks réalistes et d'autre part l'amélioration automatique, au prix de l'ajustement d'un paramètre, des erreurs de discrétisation dans les quantités physiques. Ceci permet d'approcher la limite du continu de façon efficace et finalement peu coûteuse en temps calcul par rapport à d'autres formulations comme les fermions de Ginsparg-Wilson. Le prix à payer dans cette formulation est la brisure explicite de la symétrie de saveur et de la parité par des contributions d'ordre a^2 . Celles-ci disparaissent dans la limite du continu, ce qui doit être vérifié au cas par cas. C'est une des motivations des nouvelles simulations à $\beta = 4.2$ pour $N_f = 2$ qui sont présentées dans cette thèse.

Les résultats, dans le cas $N_f = 2$ pour les masses du nucléon et du Δ sont en très bon accord avec l'expérience une fois extrapolés vers la limite du pion physique au moyen de la théorie de perturbation chirale. Un point satisfaisant est l'absence, aux erreurs statistiques près, de violation d'isospin pour le Δ . Bien que les résultats concernant la masse du nucléon pour les simulations $N_f = 2 + 1 + 1$ avec quatre saveurs de quarks soient encore préliminaires, car la génération des configurations de jauge est toujours en cours, il semble que l'accord avec l'expérience est aussi bon. Pour la masse du nucléon on n'observe pas d'effet important dû à la présence du quark s dynamique ce qui suggère que le contenu étrange du nucléon est plutôt faible. L'effort actuel mis par la collaboration ETM sur les simulations $N_f = 2 + 1 + 1$ devrait permettre de disposer bientôt d'un jeu de paramètres plus important qui autorisera une analyse détaillée des masses du nucléon et du Δ comme celle réalisée pour $N_f = 2$. L'analyse pourra même être plus raffinée avec la présence du quark s dans la mer ce qui n'était pas le cas jusqu'alors. L'analyse des baryons étranges sur des configurations $N_f = 2$ qui n'est pas présentée ici mais à fait l'objet d'un récent article [41] a en effet utilisé l'approximation "partially quenched".

Le calcul des observables plus compliquées que sont les facteurs de forme et les distributions de partons présenté dans la dernière partie de la thèse est encore dans un état préliminaire pour les simulations $N_f = 2$ et n'a pas commencé dans le cas $N_f = 2 + 1 + 1$. Les difficultés pratiques supplémentaires rencontrées par rapport aux calculs des masses correspondent au choix des états hadroniques (spin, impulsion), au choix des opérateurs et à la renormalisation. Le calcul se limite pour l'instant au premier moment des distributions et le calcul non perturbatif des constantes de renormalisation des opérateurs de twist n'est pas totalement terminé ce qui empêche toute comparaison

sérieuse avec l'expérience. Pour les facteurs de forme les constantes de renormalisation calculées non perturbativement par la méthode RI/MOM sont disponibles. Pour les facteurs de forme électrique et magnétique, l'accord avec l'expérience est semi-quantitatif avec des différences de l'ordre de 10 à 20%, comme le montrent les valeurs extraites pour les masses vectorielles et axiales et les valeurs à la limite de transfert nul. Pour le facteur de forme axial les conclusions sont les mêmes que pour les facteurs de forme électromagnétiques. En ce qui concerne le facteur de forme pseudoscalaire on observe le comportement caractéristique du pôle de pion. Néanmoins une seule valeur de la maille correspondant à $\beta = 3.9$ a jusqu'à présent été utilisée ce qui empêche toute extrapolation vers la limite du continu et donc toute extrapolation chirale. Ainsi on ne peut exclure qu'une partie des différences s'estompe après une analyse plus poussée des résultats. Les résultats à propos des moments des distributions de partons semblent plus éloignés de l'expérience mais ils sont plus préliminaires car les constantes de renormalisation ne sont pas encore déterminées de manière définitive.

Le calcul des distributions de partons généralisées, qui était en filigrane du sujet de thèse n'a pas encore débouché sur des résultats concrets. Il faut noter que toute l'infrastructure (configurations de jauge, codes et moyens de calcul) sont maintenant disponibles et que leur exploitation est simplement retardée par le manque de temps et de main d'oeuvre.

Une part importante du travail de la thèse a été consacrée à la génération des configurations de jauge $N_f = 2$ avec $\beta = 4.2$ afin de disposer d'une maille plus fine supplémentaire et $N_f = 2 + 1 + 1$ où les quarks s et c sont dynamiques, c'est-à-dire contribuent au déterminant fermionique, en plus des quarks u et d . Cette tâche a nécessité l'ajustement des paramètres de simulation des algorithmes HMC et PHMC comme détaillé dans les sections correspondantes. Il a aussi fallu ajuster les paramètres physiques comme la valeur de κ qui conditionne l'amélioration des erreurs de discrétisation. Cette étape est essentielle pour les calculs sur réseau et les configurations de jauge produites sont ensuite utilisées au sein de la collaboration ETM pour une large palette de projets, pas seulement pour l'étude des baryons. À terme l'accès à ces configurations est ouvert au public. Cette partie du travail est celle qui est la plus gourmande en terme de ressources informatiques. Elle n'a pu être effectuée en France que grâce à l'acquisition de la BlueGene/P par l'IDRIS en 2008. Sans une telle machine, une partie du travail et des résultats présentés dans cette thèse n'aurait pas pu avoir lieu. On peut d'ailleurs noter que la situation en France dans les trois centres de calcul nationaux (IDRIS, CCRT et CINES) s'est considérablement améliorée au niveau du calcul haute performance au cours de ces trois dernières années. Il faut espérer que cette évolution positive va continuer car l'ère du pétaflop soutenu a été atteinte récemment et que les besoins sont aussi importants dans d'autres domaines.

Le développement futur des calculs sur réseau est bien sûr lié aux progrès dans la formulation discrétisée et l'algorithmique. Ce sont les progrès sur ces deux axes qui ont permis des avancées spectaculaires durant les vingt dernières années. Mais surtout, il sera dépendant du développement et de la disponibilité de moyens de calculs adaptés. L'arrivée de nouvelles architectures permettant un parallélisme massif avec un coût raisonnable, comme par exemple les cartes graphiques, est une des voies actuelles de développement. L'avenir dira si elle peut concurrencer efficacement les machines classiques dans le domaine de QCD sur réseau. Le projet PetaQCD financé par l'ANR et qui a débuté en 2009 doit en particulier évaluer les différentes architectures et les al-

algorithmes envisagés pour atteindre une performance de l'ordre du pétaflop au service des calculs sur réseau. Une telle puissance de calcul rendrait possible la simulation à la masse du pion physique sur des réseaux de taille environ $128^3 \times 256$ et ayant une maille suffisamment fine pour limiter à la fois les effets de volume fini et de discrétisation. Ainsi, il est réaliste de penser pouvoir obtenir des précisions de l'ordre du pour cent dans les prochaines années afin de réduire l'erreur théorique qui domine l'extraction de certaines quantités à partir des données expérimentales.

Dixième partie

Annexes

Sommaire

26	Conventions	129
27	Matrices de Gell-Mann	129
28	Algèbre de Grassmann	130
29	Ordres de grandeurs	131
30	Exemples de fichiers d'entrée pour le code tmLQCD	131
31	Exemple de script pour BlueGene	134
	Références	136

26 Conventions

- A, B, \dots (lettres latines majuscules) sont utilisés pour les indices de saveur.
- a, b, \dots (lettres latines minuscules) sont utilisés pour les indices de couleur.
- α, β, \dots (lettres grecques) sont utilisés pour les indices de Dirac.
- Quand un indice apparaît deux fois une somme implicite est entendue.

Les matrices γ sont choisies hermitiennes et satisfaisant $\{\gamma_\mu, \gamma_\nu\} = 2\delta_{\mu,\nu}$ ($\mu, \nu \in \{0, 1, 2, 3\}$). Dans le code tmLQCD les matrices gamma sont les suivantes :

$$\begin{aligned}\gamma_0 &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad \gamma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & i \\ 0 & 0 & i & 0 \\ 0 & -i & 0 & 0 \\ -i & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \\ \gamma_2 &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad \gamma_3 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & i & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -i \\ -i & 0 & 0 & 0 \\ 0 & i & 0 & 0 \end{pmatrix} \\ \gamma_5 &= \gamma_0 \gamma_1 \gamma_2 \gamma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \quad C = \gamma_0 \gamma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \end{pmatrix}\end{aligned}$$

Les matrices de Pauli sont

$$\tau_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \tau_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad \tau_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

27 Matrices de Gell-Mann

$$\begin{aligned}\lambda_1 &= \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad \lambda_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad \lambda_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \\ \lambda_4 &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad \lambda_5 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad \lambda_6 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \\ \lambda_7 &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix} \quad \lambda_8 = \frac{1}{\sqrt{3}} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -2 \end{pmatrix}\end{aligned}$$

Ces matrices satisfont les relations de normalisation $\text{Tr}(\lambda_a \lambda_b) = 2\delta_{ab}$ et de commutation $[\lambda_a, \lambda_b] = 2if_{abc}\lambda_c$

28 Algèbre de Grassmann

L'introduction des variables de Grassmann est nécessaire pour les fermions afin de satisfaire la bonne statistique pour ces particules, celle de Fermi-Dirac. En effet les champs de fermions satisfont des relations canoniques d'anti-commutation contrairement aux relations canoniques de commutation pour les champs bosoniques.

Les générateurs θ_j d'une algèbre de Grassmann à N dimensions vérifient

$$\{\theta_j, \theta_k\} = \theta_j \theta_k + \theta_k \theta_j = 0 \quad \forall i, j = 1, 2, \dots, N$$

En particulier $\theta^2 = 0$, ce qui simplifie le développement en série des fonctions

$$e^\theta = 1 + \theta$$

Soient θ_i et $\bar{\theta}_i$ les générateurs complexes indépendants d'une algèbre de Grassmann, alors les règles d'intégration (Berezin) sont :

$$\int d\theta_i = \int d\bar{\theta}_i = 0$$

et

$$\int d\theta_i \theta_i = \int d\bar{\theta}_i \bar{\theta}_i = 1$$

Pour éviter une ambiguïté de signe nous adoptons la convention

$$\int d\bar{\theta}_i d\theta_j \theta_j \bar{\theta}_i = 1$$

L'évaluation d'une intégrale gaussienne donne

$$b \in \mathbb{R}_+^* \quad \int d\bar{\theta} d\theta e^{-\bar{\theta} b \theta} = \int d\bar{\theta} d\theta (1 - \bar{\theta} b \theta) = b \int d\bar{\theta} d\theta \theta \bar{\theta} = b$$

alors que dans le cas commutatif

$$\int d\bar{x} dx e^{-\bar{x} b x} = \frac{2\pi}{b}$$

Une formule encore plus générale est

$$\begin{aligned} & \int [d\bar{\Psi}_1][d\Psi_1] \dots [d\bar{\Psi}_N][d\Psi_N] \Psi_{j_1} \bar{\Psi}_{i_1} \dots \Psi_{j_n} \bar{\Psi}_{i_n} e^{-\int \bar{\psi}(x) M \psi(x)} \\ &= \det(M) \sum_{k_1 \dots k_n} \epsilon_{j_1 j_2 \dots j_n}^{k_1 k_2 \dots k_n} M_{k_1 i_1}^{-1} \dots M_{k_n i_n}^{-1} \end{aligned} \quad (72)$$

avec

$$\epsilon_{j_1 j_2 \dots j_n}^{k_1 k_2 \dots k_n} = \begin{cases} 1 & \text{si } (k_1 k_2 \dots k_n) \text{ est une permutation de signature positive de } (j_1 j_2 \dots j_n) \\ -1 & \text{si } (k_1 k_2 \dots k_n) \text{ est une permutation de signature négative de } (j_1 j_2 \dots j_n) \\ 0 & \text{si } (k_1 k_2 \dots k_n) \text{ n'est pas une permutation de } (j_1 j_2 \dots j_n) \end{cases}$$

29 Ordres de grandeurs

Les tailles suivantes sont données en mégaoctets (1 Mo = 1 000 000 octets). On suppose un stockage en double précision (8 octets) et l'on ne prend pas en compte la taille des en-têtes.

L	T	Taille configuration	Taille tranche temporelle configuration
24	48	382.2	8
32	64	1 208.0	18.9
48	96	6 115.3	63.7
64	128	19 327.4	151.0
96	192	97 844.7	509.6

Dans le tableau ci-dessous, tous les indices de Dirac et de couleur à la fois à la source et au puits sont compris.

L	T	Taille propagateur	Taille tranche temporelle propagateur
24	48	1 528.8	31.9
32	64	4 831.8	75.5
48	96	24 461.2	254.8
64	128	77 309.4	604.0
96	192	391 378.9	2 038.4

30 Exemples de fichiers d'entrée pour le code tm-LQCD

Il faut faire attention pour les versions inférieures à 5 du code car il faut entrer la valeur de $2\kappa\mu$ sur la ligne 'mu='. Ce facteur 2κ est aussi à prendre en compte pour les lignes 'PhmcMuBar=' et 'PhmcEpsBar='

Fichier de paramètres pour une inversion avec source locale

```

L=24
T=48
NrXProcs=1
NrYProcs=1
5 NrZProcs=1
CSW=0.0
Measurements=1
beta=3.9
mu=0.00321712
10 MassNumber=0
kappa=0.160856
MaxSolverIterations=10000
GaugeConfigInputFile=conf.2730
SolverPrecision=1.e-14
15 UseRelativePrecision=yes

```

```

SplittedPropagator=no
BCAngleT=1.0
RecEv=0
ReadSource=no
20 SourceInputFilename=source_gauss_format_hmc
SourceLocation=0
DebugLevel=0

```

Fichier de paramètres pour une inversion en lisant une source

```

T=48
L=24

NrXProcs=1
5 NrYProcs=1
NrZProcs=1

SolverFlag=CG
MaxSolverIterations=10000
10 Measurements=1
beta=1.90
mu=0.0032651
PhmcMuBar=0.0489765
PhmcEpsBar=0.0620369
15 kappa=0.163255
BCAngleT=1.
CGMaxIter=10000
GaugeConfigInputFile=conf
20 DebugLevel=0

Readsource=yes

UseRelativePrecision=yes
25 SolverPrecision=1.e-14
GaugeConfigReadPrecision=64
SplittedSource=yes
SplittedPropagator=yes
PropagatorPrecision=32
30 Indices=0-7
SourceInputFilename=source.0208.42
InitialStoreCounter=208
SourceTimeSlice=42

```

Fichier de paramètres pour une simulation 2+1+1

```

L=24
T=48
NrXProcs = 8
NrYProcs = 8
5 NrZProcs = 4

Measurements = 1
startCondition = continue

10 RGIC1 = -0.331
   beta = 1.9
   mu = 0.0032651
   mu2 = 0.026
   mu3 = 0.26
15 PhmcMubar = 0.0489765
   PhmcEpsbar = 0.0620369
   #
   # Remember: the values of <mu>, <PhmcMubar> and <PhmcEpsbar>
   # have to be multiplied by 2*kappa !!!
20 #
   kappa = 0.163255
   Nskip = 2
   BoundaryCond = 1.
   BCGstabMaxIter = 1000
25 CGMaxIter = 7000
   GaugeConfigInputFile = conf.save

   Integrator = 2MN
   #Integrator = SextonWeingarten
30
   tau = 1.0

   IntegrationStepsGauge = 1
   IntegrationStepsMu = 18
35 IntegrationStepsMu2 = 1
   IntegrationStepsMu3 = 2
   TimeScaleHeavyDoublet = 1

   CSGHistMu = 0
40 CSGHistMu2 = 0
   CSGHistMu3 = 0

   UseRelativePrecision = yes
   AcceptancePrecision = 1.e-22
45 ForcePrecisionMu = 1.e-14
   ForcePrecisionMu2 = 1.e-14

```

```

ForcePrecisionMu3 = 1.e-12
#level of output
DebugLevel = 1
50 #parameters of the symplectic integrator.
    2MNLambdaMu = 0.21
    2MNLambdaMu2 = 0.2
    2MNLambdaMu3 = 0.2
    2MNLambdaGauge = 0.19
55 GaugeConfigReadPrecision = 64

ReversibilityCheck = yes
ReversibilityCheckIntervall = 55

60 InitialStoreCounter = readin

PhmcNoFlavours=2+1+1
PhmcPrecisionPtilde = 1.0e-9
PhmcDegreeOfP=150
65 PhmcStildeMax=2.470
    PhmcStildeMin=0.0000741
    PhmcRecEVIInterval=1
    PhmcComputeOnlyEVs=no
    PerformOnlineMeasurements = yes
70 OnlineMeasurementsFreq = 2

```

31 Exemple de script pour BlueGene

Pour le système de batch LoadLeveler d'IBM

```

1  # @ job_name           = NF2_48c96_154073
2  # @ error              = $(job_name).$(jobid).err
3  # @ output             = $(job_name).$(jobid).out
4  # @ environment        = COPY_ALL;
5  # @ wall_clock_limit   = 10:00:00
6  # @ job_type           = BLUEGENE
7  # @ bg_size            = 2048
8  # @ bg_connection      = torus
9  # @ notification       = always
10 # @ queue
11
12 #!/bin/bash
13
14 echo LOADL_STEP_CLASS = $LOADL_STEP_CLASS
15 echo LOADL_BG_SIZE = $LOADL_BG_SIZE
16 echo LOADL_STEP_ID = $LOADL_STEP_ID

```

```
17 echo LOADL_BG_BPS = $LOADL_BG_BPS
18 echo LOADL_BG_IONODES = $LOADL_BG_IONODES
19 echo LOADL_BG_CONNECTION = $LOADL_BG_CONNECTION
20 echo LOADL_BG_SHAPE = $LOADL_BG_SHAPE
21
22 mpirun -exe hmc_tm -args "-f hmc.input" -env "DCMF_EAGER=500000000" \
23 -mode VN -np $((4*$LOADL_BG_SIZE)) -verbose 1
24
```

Références

- [1] Stephen L. Adler. Axial vector vertex in spinor electrodynamics. *Phys. Rev.*, 177 :2426–2438, 1969.
- [2] M. Albanese et al. Glueball Masses and String Tension in Lattice QCD. *Phys. Lett.*, B192 :163–169, 1987.
- [3] C. Alexandrou et al. Light baryon masses with dynamical twisted mass fermions. *Phys. Rev.*, D78 :014509, 2008.
- [4] C. Alexandrou, G. Koutsou, John W. Negele, and A. Tsapalis. The nucleon electromagnetic form factors from lattice QCD. *Phys. Rev.*, D74 :034508, 2006.
- [5] Constantia Alexandrou et al. Nucleon form factors with dynamical twisted mass fermions. 2008.
- [6] A. Ali Khan et al. The nucleon mass in $N(f) = 2$ lattice QCD : Finite size effects from chiral perturbation theory. *Nucl. Phys.*, B689 :175–194, 2004.
- [7] S. Aoki et al. 2+1 Flavor Lattice QCD toward the Physical Point. 2008.
- [8] Sinya Aoki. New Phase Structure for Lattice QCD with Wilson Fermions. *Phys. Rev.*, D30 :2653, 1984.
- [9] A.Zee. *Quantum field theory in a nutshell*. Princeton University Press, 2003.
- [10] Rémi Baron et al. Moments of meson distribution functions with dynamical twisted mass fermions. *PoS*, LAT2007 :153, 2007.
- [11] Rémi Baron et al. Status of ETMC simulations with $N_f=2+1+1$ twisted mass fermions. *PoS*, LATTICE2008 :094, 2008.
- [12] Véronique Bernard. Chiral Perturbation Theory and Baryon Properties. *Prog. Part. Nucl. Phys.*, 60 :82–160, 2008.
- [13] Véronique Bernard, Latifa Elouadrhiri, and Ulf. G. Meissner. Axial structure of the nucleon. *J. Phys.*, G28 :R1–R35, 2002.
- [14] Véronique Bernard, Thomas R. Hemmert, and Ulf-G. Meissner. Cutoff schemes in chiral perturbation theory and the quark mass expansion of the nucleon mass. *Nucl. Phys.*, A732 :149–170, 2004.
- [15] B. Blossier et al. Light quark masses and pseudoscalar decay constants from $N_f=2$ Lattice QCD with twisted mass fermions. *JHEP*, 04 :020, 2008.
- [16] B. Blossier et al. Pseudoscalar decay constants of kaon and D-mesons from $N_f=2$ twisted mass Lattice QCD. 2009.
- [17] Benoit Blossier, Marc Wagner, and Olivier Pene. Lattice calculation of the Isgur-Wise functions $\tau_{1/2}$ and $\tau_{3/2}$ with dynamical quarks. 2009.
- [18] Marco Bochićchio, Luciano Maiani, Guido Martinelli, Gian Carlo Rossi, and Massimo Testa. Chiral Symmetry on the Lattice with Wilson Fermions. *Nucl. Phys.*, B262 :331, 1985.
- [19] Ph. Boucaud et al. Dynamical twisted mass fermions with light quarks. *Phys. Lett.*, B650 :304–311, 2007.
- [20] Ph. Boucaud et al. Dynamical Twisted Mass Fermions with Light Quarks : Simulation and Analysis Details. *Comput. Phys. Commun.*, 179 :695–715, 2008.

- [21] Dirk Brommel et al. Moments of generalized parton distributions and quark angular momentum of the nucleon. *PoS*, LAT2007 :158, 2007.
- [22] R. C. Brower, T. Ivanenko, A. R. Levi, and K. N. Orginos. Chronological inversion method for the Dirac matrix in hybrid Monte Carlo. *Nucl. Phys.*, B484 :353–374, 1997.
- [23] G. E. Brown and Mannque Rho. The Little Bag. *Phys. Lett.*, B82 :177–180, 1979.
- [24] B. Bunk, Stephan Elser, R. Frezzotti, and K. Jansen. Ordering monomial factors of polynomials in the product representation. *Comput. Phys. Commun.*, 118 :95–109, 1999.
- [25] C-LIME. <http://usqcd.jlab.org/usqcd-docs/c-lime/>.
- [26] Jr. Callan, Curtis G., Roger F. Dashen, and David J. Gross. Toward a theory of the strong interactions. *Phys. Rev.*, D17 :2717, 1978.
- [27] Brant Knudson Carlos Sosa. Ibm system blue gene solution : Blue gene/p application development. <http://www.redbooks.ibm.com/abstracts/sg247287.html>.
- [28] T. Chiarappa et al. Numerical simulation of QCD with u, d, s and c quarks in the twisted-mass Wilson formulation. *Eur. Phys. J.*, C50 :373–383, 2007.
- [29] A. Chodos, R. L. Jaffe, K. Johnson, Charles B. Thorn, and V. F. Weisskopf. A New Extended Model of Hadrons. *Phys. Rev.*, D9 :3471–3495, 1974.
- [30] Seonho Choi et al. Axial and pseudoscalar nucleon form-factors from low- energy pion electroproduction. *Phys. Rev. Lett.*, 71 :3927–3930, 1993.
- [31] M. A. Clark and A. D. Kennedy. The RHMC algorithm for 2 flavors of dynamical staggered fermions. *Nucl. Phys. Proc. Suppl.*, 129 :850–852, 2004.
- [32] Gilberto Colangelo, Stephan Durr, and Christoph Haefeli. Finite volume effects for meson masses and decay constants. *Nucl. Phys.*, B721 :136–174, 2005.
- [33] M. Creutz. Monte Carlo Study of Quantized SU(2) Gauge Theory. *Phys. Rev.*, D21 :2308–2315, 1980.
- [34] M. Creutz. *Quarks, gluons and lattices*. Cambridge University Press, 1983.
- [35] C. T. H. Davies et al. A Precise determination of alpha-s from lattice QCD. *Phys. Lett.*, B345 :42–48, 1995.
- [36] C. T. H. Davies et al. Scaling of the Upsilon spectrum in lattice NRQCD. *Phys. Rev.*, D58 :054505, 1998.
- [37] Thomas A. DeGrand and Richard D. Loft. Wave function tests for lattice QCD spectroscopy. *Comput. Phys. Commun.*, 65 :84–91, 1991.
- [38] M. Diehl. Generalized parton distributions. *Phys. Rept.*, 388 :41–277, 2003.
- [39] P. Dimopoulos et al. Renormalisation of quark bilinears with Nf=2 Wilson fermions and tree-level improved gauge action. *PoS*, LAT2007 :241, 2007.
- [40] D. Dolgov et al. Moments of nucleon light cone quark distributions calculated in full lattice QCD. *Phys. Rev.*, D66 :034506, 2002.
- [41] Vincent Drach et al. Partially quenched study of strange baryon with Nf = 2 twisted mass fermions. *PoS*, LATTICE2008 :123, 2008.
- [42] S. Duane, A. D. Kennedy, B. J. Pendleton, and D. Roweth. Hybrid Monte Carlo. *Phys. Lett.*, B195 :216–222, 1987.

- [43] B. Efron and R. J. Tibshirani. *An Introduction to the Bootstrap*. Monographs on Statistics and Applied Probability, Vol. 57, CRC Press. Chapman & Hall, New York, 1993.
- [44] John R. Ellis, Keith A. Olive, and Christopher Savage. Hadronic Uncertainties in the Elastic Scattering of Supersymmetric Dark Matter. *Phys. Rev.*, D77 :065026, 2008.
- [45] Michael E. Peskin and Daniel V. Schroeder. *An introduction to quantum field theory*. Westview Press, 1995.
- [46] M. Falcioni, M. L. Paciello, G. Parisi, and B. Taglienti. Again on SU(3) glueball mass. *Nucl. Phys.*, B251 :624–632, 1985.
- [47] Nadia Fettes, Ulf-G. Meissner, and Sven Steininger. Pion nucleon scattering in chiral perturbation theory. I : Isospin-symmetric case. *Nucl. Phys.*, A640 :199–234, 1998.
- [48] R. Frezzotti, G. Martinelli, M. Papinutto, and G. C. Rossi. Reducing cutoff effects in maximally twisted lattice QCD close to the chiral limit. *JHEP*, 04 :038, 2006.
- [49] R. Frezzotti and G. C. Rossi. Chirally improving Wilson fermions. I : O(a) improvement. *JHEP*, 08 :007, 2004.
- [50] R. Frezzotti and G. C. Rossi. Twisted-mass lattice QCD with mass non-degenerate quarks. *Nucl. Phys. Proc. Suppl.*, 128 :193–202, 2004.
- [51] R. Frezzotti and G. C. Rossi. O(a^2) cutoff effects in lattice wilson fermion simulations. *Notes internes collaboration ETMC*, 2009.
- [52] Roberto Frezzotti, Pietro Antonio Grassi, Stefan Sint, and Peter Weisz. Lattice QCD with a chirally twisted mass term. *JHEP*, 08 :058, 2001.
- [53] Roberto Frezzotti and Karl Jansen. A polynomial hybrid Monte Carlo algorithm. *Phys. Lett.*, B402 :328–334, 1997.
- [54] R. Friedberg and T. D. Lee. QCD and the Soliton Model of Hadrons. *Phys. Rev.*, D18 :2623, 1978.
- [55] Kazuo Fujikawa. Path Integral Measure for Gauge Invariant Fermion Theories. *Phys. Rev. Lett.*, 42 :1195, 1979.
- [56] S. Galster et al. Elastic electron - deuteron scattering and the electric neutron form-factor at four momentum transfers $5\text{-fm}^{*-2} < q^{*2} < 14\text{-fm}^{*-2}$. *Nucl. Phys.*, B32 :221–237, 1971.
- [57] J. Gasser and H. Leutwyler. Quark Masses. *Phys. Rept.*, 87 :77–169, 1982.
- [58] J. Gasser and H. Leutwyler. Chiral Perturbation Theory to One Loop. *Ann. Phys.*, 158 :142, 1984.
- [59] J. Gasser and H. Leutwyler. Light Quarks at Low Temperatures. *Phys. Lett.*, B184 :83, 1987.
- [60] J. Gasser, H. Leutwyler, and M. E. Sainio. Sigma term update. *Phys. Lett.*, B253 :252–259, 1991.
- [61] V. Gimenez, Leonardo Giusti, F. Rapuano, and M. Talevi. Non-perturbative renormalization of quark bilinears. *Nucl. Phys.*, B531 :429–445, 1998.
- [62] Paul H. Ginsparg and Kenneth G. Wilson. A Remnant of Chiral Symmetry on the Lattice. *Phys. Rev.*, D25 :2649, 1982.

- [63] M. Gockeler et al. Composite operators in lattice QCD : Nonperturbative renormalization. *Nucl. Phys. Proc. Suppl.*, 73 :291–293, 1999.
- [64] M. Gockeler et al. Nucleon electromagnetic form factors with Wilson fermions. *PoS, LAT2007* :161, 2007.
- [65] Steven A. Gottlieb, W. Liu, D. Toussaint, R. L. Renken, and R. L. Sugar. Hybrid Molecular Dynamics Algorithms for the Numerical Simulation of Quantum Chromodynamics. *Phys. Rev.*, D35 :2531–2542, 1987.
- [66] Rajan Gupta. General physics motivations for numerical simulations of quantum field theory. 1999.
- [67] Ph. Hagler et al. Nucleon Generalized Parton Distributions from Full Lattice QCD. *Phys. Rev.*, D77 :094502, 2008.
- [68] Martin Hasenbusch. Speeding up the Hybrid-Monte-Carlo algorithm for dynamical fermions. *Phys. Lett.*, B519 :177–182, 2001.
- [69] Anna Hasenfratz and Francesco Knechtli. Flavor symmetry and the static potential with hypercubic blocking. *Phys. Rev.*, D64 :034504, 2001.
- [70] W. K. Hastings. Monte carlo sampling methods using markov chains and their applications. *Biometrika*, 57(1) :97–109, April 1970.
- [71] ILDG. <http://ildg.sasr.edu.au/Plone>.
- [72] Nathan Isgur and Gabriel Karl. P Wave Baryons in the Quark Model. *Phys. Rev.*, D18 :4187, 1978.
- [73] Nathan Isgur and Mark B. Wise. Weak transition form-factors between heavy mesons. *Phys. Lett.*, B237 :527, 1990.
- [74] Y. Iwasaki. Renormalization group analysis of lattice theories and improved lattice action. 2. Four-dimensional nonabelian SU(N) gauge model. UTHEP-118.
- [75] K. Jansen, Christopher Michael, and C. Urbach. The eta' meson from lattice QCD. *Eur. Phys. J.*, C58 :261–269, 2008.
- [76] K. Jansen and C. Urbach. tmLQCD : a program suite to simulate Wilson Twisted mass Lattice QCD. 2009.
- [77] Xiang-Dong Ji. Gauge invariant decomposition of nucleon spin. *Phys. Rev. Lett.*, 78 :610–613, 1997.
- [78] D. R. T. Jones. Two Loop Diagrams in Yang-Mills Theory. *Nucl. Phys.*, B75 :531, 1974.
- [79] W. Kamleh, D. B. Leinweber, and A. G. Williams. Dynamical FLIC fermions. *Nucl. Phys. Proc. Suppl.*, 129 :826–828, 2004.
- [80] David B. Kaplan. A Method for simulating chiral fermions on the lattice. *Phys. Lett.*, B288 :342–347, 1992.
- [81] Werner Krauth. *Statistical Mechanics : Algorithms and Computations (Oxford Master Series in Statistical, Computational, and Theoretical Physics)*. Oxford Univ Pr (Txt), pap/cdr edition, November 2006.
- [82] A. Le Yaouanc, L. Oliver, O. Pene, and J. C. Raynal. *Hadron transitions in the quark model*. Gordon and Breach Science Publisher, 1988.
- [83] Y. Liang, Keh-Fei Liu, Bing-An Li, S. J. Dong, and K. Ishikawa. Lattice calculation of glueball matrix elements. *Phys. Lett.*, B307 :375–382, 1993.

- [84] Huey-Wen Lin, Tom Blum, Shigemi Ohta, Shoichi Sasaki, and Takeshi Yamazaki. Nucleon structure with two flavors of dynamical domain- wall fermions. *Phys. Rev.*, D78 :014505, 2008.
- [85] Z. Liu. Notes on the renormalization constants of twist-2 operators with twisted mass fermions. *Notes internes collaboration ETMC*, 2009.
- [86] J. Gonzalez Lopez, K. Jansen, and A. Shindler. Analysis of the Schroedinger Functional with Chirally Rotated Boundary Conditions. *POS, LATTICE2008* :242, 2008.
- [87] Vittorio Lubicz, Silvano Simula, and Cecilia Tarantino. Light quark masses and pseudoscalar decay constants from $N_f=2$ twisted mass QCD. *PoS, LAT2007* :374, 2007.
- [88] Martin Lüscher. A Portable high quality random number generator for lattice field theory simulations. *Comput. Phys. Commun.*, 79 :100–110, 1994.
- [89] Martin Lüscher. Local coherence and deflation of the low quark modes in lattice QCD. *JHEP*, 07 :081, 2007.
- [90] G. Martinelli, C. Pittori, Christopher T. Sachrajda, M. Testa, and A. Vladikas. A General method for nonperturbative renormalization of lattice operators. *Nucl. Phys.*, B445 :81–108, 1995.
- [91] Makoto Matsumoto and Takuji Nishimura. Mersenne twister : a 623-dimensionally equidistributed uniform pseudo-random number generator. *ACM Trans. Model. Comput. Simul.*, 8(1) :3–30, 1998.
- [92] C. McNeile, C. Michael, and C. Urbach. The omega-rho meson mass splitting and mixing from lattice QCD. *Phys. Lett.*, B674 :286–290, 2009.
- [93] N. Metropolis, A. W. Rosenbluth, M. N. Rosenbluth, A. H. Teller, and E. Teller. Equation of state calculations by fast computing machines. *J. Chem. Phys.*, 21 :1087–1092, 1953.
- [94] Christopher Michael and M. Teper. The Glueball Spectrum in $SU(3)$. *Nucl. Phys.*, B314 :347, 1989.
- [95] Christopher Michael and Carsten Urbach. Neutral mesons and disconnected diagrams in Twisted Mass QCD. *PoS, LAT2007* :122, 2007.
- [96] I. Montvay and G. Munster. *Quantum fields on a lattice*. Cambridge University Press, 1994.
- [97] Colin Morningstar and Mike J. Peardon. Analytic smearing of $SU(3)$ link variables in lattice QCD. *Phys. Rev.*, D69 :054501, 2004.
- [98] Herbert Neuberger. Exactly massless quarks on the lattice. *Phys. Lett.*, B417 :141–144, 1998.
- [99] Herbert Neuberger. More about exactly massless quarks on the lattice. *Phys. Lett.*, B427 :353–355, 1998.
- [100] Holger Bech Nielsen and M. Ninomiya. Absence of Neutrinos on a Lattice. 1. Proof by Homotopy Theory. *Nucl. Phys.*, B185 :20, 1981.
- [101] Holger Bech Nielsen and M. Ninomiya. Absence of Neutrinos on a Lattice. 2. Intuitive Topological Proof. *Nucl. Phys.*, B193 :173, 1981.
- [102] Holger Bech Nielsen and M. Ninomiya. Erratum. Absence of Neutrinos on a Lattice. 1. Proof by Homotopy Theory. *Nucl. Phys.*, B195 :541, 1982.

- [103] Shigemi Ohta and Takeshi Yamazaki. Nucleon structure with dynamical (2+1)-flavor domain wall fermions lattice QCD. 2008.
- [104] I. P. Omelyan, I. M. Mryglod, and R. Folk. Optimized verlet-like algorithms for molecular dynamics simulations. *Phys. Rev. E*, 65(5) :056706, May 2002.
- [105] I. P. Omelyan, I. M. Mryglod, and R. Folk. Symplectic analytically integrable decomposition algorithms : classification, derivation, and application to molecular dynamics, quantum and celestial mechanics simulations. *Computer Physics Communications*, 151(3) :272 – 314, 2003.
- [106] Heinz Pagels. Departures from Chiral Symmetry : A Review. *Phys. Rept.*, 16 :219, 1975.
- [107] M. M. Pavan, I. I. Strakovsky, R. L. Workman, and R. A. Arndt. The pion nucleon Sigma term is definitely large : Results from a GWU analysis of pi N scattering data. *PiN Newslett.*, 16 :110–115, 2002.
- [108] Carlos Pena, Stefan Sint, and Anastassios Vladikas. Twisted mass QCD and lattice approaches to the Delta(I) = 1/2 rule. *JHEP*, 09 :069, 2004.
- [109] M. Procura, B. U. Musch, T. Wollenweber, T. R. Hemmert, and W. Weise. Nucleon mass : From lattice QCD to the chiral limit. *Phys. Rev.*, D73 :114510, 2006.
- [110] Massimiliano Procura, Thomas R. Hemmert, and Wolfram Weise. Nucleon mass, sigma term and lattice QCD. *Phys. Rev.*, D69 :034505, 2004.
- [111] M. H. Quenouille. Notes on bias in estimation. *Biometrika*, 43, No. 3/4 :353–360, 1956.
- [112] Dru B. Renner and Xu Feng. Hadronic contribution to g-2 from twisted mass fermions. 2009.
- [113] Stefan Scherer. Chiral Perturbation Theory : Introduction and Recent Results in the One-Nucleon Sector. 2009.
- [114] SciDAC. <http://www.scidac.gov/>.
- [115] J. C. Sexton and D. H. Weingarten. Hamiltonian evolution for the hybrid Monte Carlo algorithm. *Nucl. Phys.*, B380 :665–678, 1992.
- [116] S. Simula. Pseudo-scalar meson form factors with maximally twisted Wilson fermions at Nf = 2. *PoS, LAT2007* :371, 2007.
- [117] Jan Smit. *Introduction to Quantum Fields on a Lattice*. Cambridge University Press, 2002.
- [118] R. Sommer. A New way to set the energy scale in lattice gauge theories and its applications to the static force and alpha-s in SU(2) Yang-Mills theory. *Nucl. Phys.*, B411 :839–854, 1994.
- [119] K. Symanzik. Continuum Limit and Improved Action in Lattice Theories. 1. Principles and phi**4 Theory. *Nucl. Phys.*, B226 :187, 1983.
- [120] K. Symanzik. Continuum Limit and Improved Action in Lattice Theories. 2. O(N) Nonlinear Sigma Model in Perturbation Theory. *Nucl. Phys.*, B226 :205, 1983.
- [121] S. N. Syritsyn et al. Nucleon Electromagnetic Form Factors from Lattice QCD using 2+1 Flavor Domain Wall Fermions on Fine Lattices and Chiral Perturbation Theory. 2009.
- [122] Gerard 't Hooft. A planar diagram theory for strong interactions. *Nucl. Phys.*, B72 :461, 1974.

- [123] Gerard 't Hooft. Computation of the quantum effects due to a four- dimensional pseudoparticle. *Phys. Rev.*, D14 :3432–3450, 1976.
- [124] Tetsuya Takaishi and Philippe de Forcrand. Testing and tuning new symplectic integrators for hybrid Monte Carlo algorithm in lattice QCD. *Phys. Rev.*, E73 :036706, 2006.
- [125] Carsten Urbach. Lattice QCD with two light Wilson quarks and maximally twisted mass. *PoS, LAT2007* :022, 2007.
- [126] A. Walker-Loud et al. Light hadron spectroscopy using domain wall valence quarks on an Asqtad sea. 2008.
- [127] Steven Weinberg. Phenomenological Lagrangians. *Physica*, A96 :327, 1979.
- [128] Steven Weinberg. *The Quantum Theory of Fields, Volume I : Foundations*. Cambridge University Press, May 2005.
- [129] P. Weisz. Continuum Limit Improved Lattice Action for Pure Yang- Mills Theory. 1. *Nucl. Phys.*, B212 :1, 1983.
- [130] Kenneth G. Wilson. Quarks and Strings on a Lattice. New Phenomena In Subnuclear Physics. Part A. Proceedings of the First Half of the 1975 International School of Subnuclear Physics, Erice, Sicily, July 11 - August 1, 1975, ed. A. Zichichi, Plenum Press, New York, 1977, p. 69, CLNS-321.
- [131] Kenneth G. Wilson. Confinement of quarks. *Phys. Rev.*, D10 :2445–2459, 1974.
- [132] Ulli Wolff. Monte Carlo errors with less errors. *Comput. Phys. Commun.*, 156 :143–153, 2004.
- [133] Takeshi Yamazaki et al. Nucleon form factors with 2+1 flavor dynamical domain-wall fermions. *Phys. Rev.*, D79 :114505, 2009.